

XXXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekció

# Kivonatok



Miskolci Egyetem  
Műszaki Anyagtudományi Kar

2017. március 29-31.

XXXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekció  
Kivonatok

**Szerkesztette:**

Dr. Viskolcz Béla

Dr. Szemmelveisz Tamásné

**Kiadja:**

XXXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekció  
Miskolci Egyetem, Műszaki Anyagtudományi Kar

Felelős kiadó: Prof. Dr. Palotás Árpád Bence, dékán

ISBN 978-963-358-130-8

# Tartalomjegyzék

Köszöntő .....	5
A konferencia Szervező Bizottsága .....	6
A konferencián résztvevő intézmények listája.....	7
Tagozatok.....	8
Analitikai kémia I. ....	9
Analitikai kémia II. ....	21
Anyagtudomány I. ....	31
Anyagtudomány II. ....	41
Anyagtudomány III.....	53
Biokémia, biotechnológia I. ....	65
Biokémia II. ....	75
Élelmiszer kémia és élelmiszer analitika .....	87
Elméleti kémia I. ....	99
Elméleti kémia II. ....	109
Fizikai kémia.....	143
Kémiai technológia I. ....	153
Kémiai technológia II. ....	163
Kolloid- és makromolekuláris kémia.....	173
Koordinációs kémia .....	183
Környezeti kémia és környezettechnológia .....	195
Reakciókinetika és katalízis .....	1: 7
Szerves kémia I. ....	1; 9
Szerves kémia II. ....	209
Szerves kémia III. ....	221
Szerves kémia IV. ....	255
Szervetlen kémia és bioszervetlen kémia.....	267



# Köszöntő

A Miskolci Egyetem Műszaki Anyagtudományi Kara, Kémiai Intézete és Tudományos Diákköri Tanácsa tisztelettel köszönti a XXXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia, Kémiai és Vegyipari Szekciójában bemutatásra kerülő dolgozatok szerzőit és a hallgatókat segítő témavezetőket.

A tudományos diákköri tevékenységben résztvevő hallgatók jelentik a tudományos kutatói utánpótlást. Közülük is a legkiválóbbakat éri az az elismerés, hogy munkájukat országos versenyben is megmérettessék. Ez a kutatómunka azonban - nem csorbítva a hallgatók elkötelezett hozzáállását – csak a témavezetők önzetlen, segítő támogatásával lehet sikeres és eredményes.

Nagy örömünkre szolgál, hogy a szekció hagyományaihoz híven idén is nagyszámú, 190 dolgozat került nevezésre, amelyből nyolc pályamű a határon túli egyetemekről érkezett. A küldő intézmények száma összesen tizenhárom, mely magába foglalja az erdélyi és vajdasági intézményeket is.

A konferencia keretében 22 szakmai tagozatban hangzanak el az előadások. Jelen kötet az írásban beadott pályaművek magyar nyelvű kivonatát tartalmazza, a tagozati beosztás szerint. A konferencia kötetben megjelenő tanulmányok a kémia és vegyipar szinte teljes szakmai spektrumát lefedik.

A rendezvény lebonyolítását és e kötet megjelenését a Nemzeti Tehetség Program és az Emberi Erőforrások Minisztériuma által nyújtott pénzügyi források és a tudományterülethez kapcsolódó vállalatok, intézmények, egyesületek szponzori támogatása tette lehetővé. Ezúton is köszönjük a támogatók hathatós segítségét, annak reményében, hogy a háromnapos esemény a résztvevők szakmai fejlődését szolgálja.

A Miskolci Egyetem és a Műszaki Anyagtudományi Kar küldetése, a tehetséges és a tudomány iránt elkötelezett hallgatók felkarolása és kutatási eredményeik közzétételének elősegítése. E kötet publicitást nyújt a XXXIII. OTDK Kémiai és Vegyipari Szekciójának munkájában résztvevő hallgatóknak.

A konferencia szervezői nevében reméljük, hogy sikeresek lesznek a konferencián, valamint szakmai és kulturális élményekkel gazdagodva emlékeznek majd a Miskolcon töltött napokra.



Prof. Dr. Palotás Árpád Bence  
dékán  
Műszaki Anyagtudományi Kar



Dr. Szemmelveisz Tamásné  
elnök  
Kari Tudományos Diákköri  
Tanács



Prof. Dr. Viskolcz Béla  
ügyvezető elnök  
Kémiai és Vegyipari Szekció

## A konferencia Szervező Bizottsága

**Ügyvezető elnök:** Dr. Viskolcz Béla, intézetigazgató, egyetemi tanár

**Ügyvezető titkár:** Dr. Muránszky Gábor, adjunktus

**Hallgatói képviselő:** Szamák Tünde, doktorandusz Kémia Intézet

Csordás Bernadett, MSc hallgató

### A Szakmai bizottság tagjai:

**Elnök:** Skodáné Dr. Földes Rita, egyetemi tanár, PE, Veszprém

**Alelnökök:** Dr. Horvölgyi Zoltán, egyetemi tanár, BME, Budapest

Dr. Jedlovski Pál, egyetemi tanár, EKE, Eger

**Titkár:** Mészárosné Dr. Tőrinci Mercédesz, egyetemi adjunktus, BME, Budapest

### Intézmények oktatói képviselői:

Dr. Jakusch Tamás, egyetemi adjunktus, SZTE, Szeged

Dr. Jedlovsky-Hajdú Angéla, tudományos munkatárs, SOTE, Pro Sciencia Aranyérmesek Társasága

Dr. Kunsági-Máté Sándor, egyetemi docens, PTE, Pécs

Dr. Majdik Cornelia, egyetemi docens, BBT, Kolozsvár

Dr. Murányi Zoltán, főiskolai tanár, EKE, Eger

Dr. Pelles-Lemli Beáta, egyetemi adjunktus, PTE, Pécs

Dr. Ősz Katalin, egyetemi docens, DE, Debrecen

Dr. Sarka Lajos, főiskolai docens, NYF, Nyíregyháza

Dr. Vass Gábor, egyetemi adjunktus, ELTE, Budapest

Dr. Viskolcz Béla, egyetemi tanár, ME, Miskolc

Biácsi Levente, BSc hallgató, BME, Budapest

Csire Gizella, PhD hallgató, DE, Debrecen

Broda Balázs, MSc hallgató, ELTE, Budapest

Papp Máté, PhD hallgató, PE, Veszprém

Mező Emerencia, PhD hallgató, PTE, Pécs

Kutas Bence, PhD hallgató, SZTE, Szeged

## A konferencián résztvevő intézmények listája

BBTE KVK	Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar
BME VBK	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
DE TTK	Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar
DE GYTK	Debreceni Egyetem, Gyógyszerésztudományi Kar
EKE TTK	Eszterházy Károly Egyetem, Természettudományi Kar
ELTE TTK	Eötvös Lóránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar
EMTE	Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem
ME MAK	Miskolci Egyetem, Műszaki Anyagtudományi Kar
IJRSZK	Irinyi János Református Szakközépiskola és Diákotthon
PE MK	Pannon Egyetem, Mérnöki Kar
PTE TTK	Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar
UE-TMK	Újvidéki Egyetem, Természettudományi és Matematikai Kar
SZTE TTIK	Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar

# Tagozatok

Analitikai kémia I.

Analitikai kémia II.

Anyagtudomány I.

Anyagtudomány II.

Anyagtudomány III.

Biokémia, biotechnológia I.

Biokémia II.

Élelmiszer kémia és élelmiszer analitika

Elméleti kémia I.

Elméleti kémia II.

Fizikai kémia

Kémiai technológia I.

Kémiai technológia II.

Kolloid- és makromolekuláris kémia

Koordinációs kémia

Környezeti kémia és környezettechnológia

Reakciókinetika és katalízis

Szerves kémia I.

Szerves kémia II.

Szerves kémia III.

Szerves kémia IV.

Szervetlen kémia és bioszervetlen kémia



## **Analitikai kémia I.**

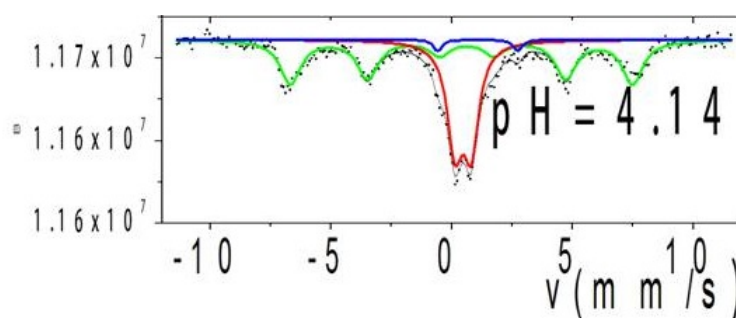


---

## **A vas kationcsere pH-függésének Mössbauer-vizsgálata montmorillonitban**

*Kulcsszavak: Ca-montmorillonit; Fe-57 Mössbauer-spektroszkópia; Rétegeközi Fe; pH-függés*

Az agyagásványok hordozóanyagként alkalmasak gyógyszerhatóanyagok szervezetbe történő ellenőrzött bevitelére, ha azok rétegeközi terébe juttatjuk a hatóanyagot. A montmorillonit rétegeközi kationjának vas(III)-ionra való cseréje által, ezen kívül még hatékony katalizátorokhoz, szenzorokhoz, adszorbensekhez is hozzájuthatunk. Korábbi vizsgálatokban a  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer-spektroszkópiát sikerrel alkalmazták [1] annak kimutatására, hogy a vas beépül a montmorillonit rétegeközi terébe ha a montmorillonitot acetone és  $\text{FeCl}_3$  elegyével kezeljük. A jelen munka célja az volt, hogy a  $\text{pH}=2,7$  és  $\text{pH}=4,14$  közötti különböző pH értékeknél acetone és  $\text{FeCl}_3$  elegyével kezelt Ca-bentonitban tanulmányozzuk a montmorillonitba való vas beépülést. Ehhez a  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer-spektroszkópiát alkalmaztuk, ami kiváló módszer erre a célra, mivel a vas rétegeközi térben való megjelenését az (80 K-nél kisebb) alacsony hőmérsékleti Mössbauer-spektrumokban fellépő, mágneses felhasadást mutató spektrum diagnosztikusan jelzi.



1. ábra.  $\text{FeCl}_3$  és acetone elegyével kezelt montmorillonit 78 K-en mért  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer-spektruma  $\text{pH}=4,14$  értéknél

A szobahőmérsékleti Mössbauer-spektrumok a Ca-bentonitra jellemző domináns  $\text{Fe}^{\text{III}}$  dublettből és egy minor  $\text{Fe}^{\text{II}}$  dublettből álltak az elvárásnak megfelelően. Ugyanakkor a 78 K-en mért Mössbauer-spektrumokban fellépett egy mágnesesen felhasadt spektrumjárulék (szextett) is (1. ábra), ami a vas atomok rétegeközi térbe való beépülését jelezte. Azt találtuk, hogy a szextett relatív spektrumterülete a pH növekedésével nőtt, ami azt mutatta, hogy a pH növekedtével egyre több vas interkalálódott a Ca-montmorillonit rétegeközi terében a montmorillonit acetone és  $\text{FeCl}_3$  elegyével való kezelés hatására. A beépülő vas relatív spektrumterületében egy hirtelen növekedés volt tapasztalható a  $\text{pH}=2,7$  és  $\text{pH}=2,91$  közötti intervallumban. Ez a  $\text{Fe}^{\text{III}}$  hidrolízisével magyarázható, ami magasabb pH-nál telítésbe megy.

**JANOVSZKY PATRICK MARTIN**

*janovszkyp@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Galbács Gábor*

*egyetemi docens, SZTE TTIK*

*Braun Mihály*

*tudományos főmunkatárs, MTA ATOMKI*

*Schubert Félix*

*egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

---

### **Cirkon-tartalmú kőzetminták vizsgálata LA-ICP-MS spektrometriával**

*Kulcsszavak: kormeghatározás; izotópeloszlás térkép; U-Pb geokronometria*

Lézer ablációs induktív csatolású plazma tömegspektrometriás (LA-ICP-MS) méréseimet cirkon tartalmú kőzetmintákon végeztem és a vizsgálatok célja annak felderítése volt, hogy milyen kémiai, illetve geokémiai vonatkozású analitikai információk és milyen megbízhatósággal nyerhetők ki ezekből a mintákból.

A munka megkezdésekor két konkrét tudományos célt tűztünk ki. Az egyik feladat annak vizsgálata volt, hogy lehetséges-e a mintában lévő cirkon kristályok lézer ablációs ICP-MS segítségével történő lokalizálása a Zr elemeloszlás térkép felvétele révén. Ez a módszer jelentősen meggyorsíthatja a geokémiai vizsgálatok szempontjából fontos, 40-100 mikrométeres cirkon szemcsék azonosítását, amelyet hagyományos módszerrel csak vékonycsiszolat készítésével vagy a cirkon szemcsék kinyerésével, hosszas munka árán lehet megvalósítani. A térképezéssel kapcsolatban a cirkon szemcséknél esetenként megjelenő zónáció megfigyelését is terveztük. Második fő célunk annak vizsgálata volt, hogy lehetséges-e kvadrupólus analízátorral ellátott LA-ICP-MS készülék segítségével geokronológiai célokra kellően pontos U-Pb kormeghatározást végezni. A vizsgálat sorozat jelentőségét az adja, hogy hagyományosan speciális tömegspektrométereket alkalmaznak erre a feladatra, amely költséges és hosszadalmas méréseket jelent.

Zr, Hf, Fe, U, Pb izotópeloszlási LA-ICP-MS térképek felvételével sikeresen lokalizáltuk a vizsgált tömbi és vékonycsiszolat mintákban előforduló, kormeghatározásra alkalmas cirkon kristályokat, optimaltunk a mérési körülményeket, majd meghatároztuk a kőzet korát. A kutatások során elért, U-Pb izotóp arányokon nyugvó geokronológiai eredmények ( $^{207}\text{Pb}/^{235}\text{U}$  kor:  $313,8 \pm 32$  millió év,  $^{206}\text{Pb}/^{238}\text{U}$  kor:  $322,4 \pm 58$  millió év) kis szórást, továbbá igen jó egyezést mutatnak a vizsgált kőzetminta korábbi, Rb-Sr korolásából származó adatokkal (330-320 millió év).

**KOVÁCS MIKLÓS MÁRTON**

*kovacsmarci95@gmail.com*

Vegyésmérnöki Alapképzési Szak, nappali BSc

BSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Höfler Lajos*

*egyetemi adjunktus, BME VBK*

---

## **Differenciális elrendezésű nanopórusos ionszelektív szenzorok vizsgálata analitikai teljesítményjellemzők szempontjából**

*Kulcsszavak: arany nanopórusos polikarbonát membrán; potenciometria; amperometria; fázishatár-potenciál; ionofor*

Különböző analitikai mintákat vizsgálva sok esetben okoz gondot a mátrixhatás. A legtöbb klinikai vizsgálat során egy biológiai mintából (pl. vészérum) egymástól függetlenül kívánjuk meghatározni az egyes komponenseket. A klinikai gyakorlatban a vér és vizelet ionkoncentrációjának a meghatározására az olcsó és megbízható ionszelektív szenzorok alkalmazása terjedt el. Ezekkel naponta több millió mérést végeznek rutinszerűen.

Kutatásom során a kutatócsoportunkban kifejlesztett differenciális elrendezésű elektrokémiai szenzorral való vizsgálatok elvégzésére volt lehetőségem. Célom, hogy továbbfejlesszem az eredetileg lágyított PVC alapú membránokon alapuló módszert [1]. A lágyított PVC alapú membránok hátránya, hogy hosszabb idő alatt a víznél lipofilebb karakterű vészérum képes extrahálni az ionszelektivitást biztosító komponenseket. Ezért olyan ionszelektív membrán használatát választottuk, amelynél az aktív komponensek kovalensen vannak rögzítve a membrán felszínéhez [2]. Ezeket a mindössze 6  $\mu\text{m}$  vastag arany nanopórusos membránokat vizsgáltam analitikai teljesítményjellemzők szempontjából. Korábban a kutatócsoportban megmutattuk, hogy lehetséges két membrán felhasználásával - ahol a két membrán között az egyetlen különbség az ionofor jelenléte - differenciális elrendezésű szenzorban alkalmazva csökkenteni a mátrixhatást a hagyományos felépítésű ionszelektív szenzorokhoz képest. Ennek bemutatására a nanopórusos szenzort potenciometriás, amperometriás és elektrokémiai impedancia spektroszkópiás méréseknek vetettem alá. A mérések sikerességének előfeltétele, hogy a nanopórusos membrán ioncserélő tulajdonsággal rendelkezzen, ezért optimalám a kovalens módosításhoz használt lipofil karakterű és az állandó töltéssel rendelkező tiolok arányát. Az ionszelektivitást tiol funkciók csoporttal rendelkező ezüst ionoforral biztosítottam. Vizsgáltam a membránok választ egyenként és differenciális elrendezésben különböző kationokra potenciometriás és amperometriás módszerekkel. Az egyes szelektivitási tényezők meghatározásán túl vizsgáltam a hagyományos és differenciális elrendezés és az alkalmazott mérési elv - potenciometria ( $I = 0\text{A}$ ) vagy amperometria ( $E = 0\text{V}$ ) - kimutatási határra és ismételhetőségre gyakorolt hatását.

[1] Nagy, X.; Höfler, L. Anal. Chem. 2016, 88, 9850–9855.

[2] Jággerszki, G.; Takács, Á.; Bitter, I.; Gyurcsányi, R.E. Angew. Chem. 2011, 50, 1656-1659.

**SLEZSÁK JÁNOS**

*janos.slezsak@gmail.com*

Biomérnöki mesterképzési szak

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Gergely Szilveszter*  
*egyetemi docens, BME VBK*

*Szabó Éva*  
*PhD hallgató, BME VBK*

---

## **Gyógyszeripari alapanyagok polimer csomagolóanyagokon keresztül való mérése különböző optikai elrendezésű NIR spektrofotométerekkel**

*Kulcsszavak: közeli infravörös spektroszkópia; PAT; kemometria; főkomponens-elemzés; klaszterelemzés*

A gyógyszergyártók számos esetben a csomagolóanyag megbontása nélkül kívánják ellenőrizni a beszállított alap-, segéd-, illetve hatóanyagok azonosságát. Erre a célra a rezgési spektroszkópiai módszerek közül a közeli infravörös (near-infrared, NIR) és a Raman-spektroszkópia által szolgáltatott jelek lehetnek alkalmasak. TDK munkám során különböző optikai elveken működő – diszperziós (dispersive, DS), Fourier-transzformációs (Fourier transform, FT) és diódasoros (diode-array, DA) – NIR spektrofotométerekkel mértem az eltérő típusú gyógyszeripari alapanyagokról a polimer csomagolóanyagokon keresztül diffúzan visszaverődő elektromágneses sugárzást. Optimáltam a mérés körülményeit a vizsgálandó gyógyszeripari összetevők és a csomagolóanyagok minősége függvényében.

A nyert (ún. „as is”), illetve a matematikai transzformációknak (pl. normálás, szóráskorrekció, simítással kombinált deriválás) alávetett NIR spektrumokat sokváltozós adatelemzésen alapuló kemometriai módszerekkel dolgoztam fel. Többek között olyan, előzetes információkat, referencia méréseket nem igénylő ún. nem irányított eljárásokat alkalmaztam, mint a főkomponens-elemzés (PCA) és a csoportelemzés (CA). A gyógyszerelőállítást ellenőrző hatóságok is felismerték a NIR alapú módszerek speciális előnyeit, ezért a folyamat- és minőségellenőrzésben „alternatív” módszerként fogadják el. Döntéselőkészítő lépésként ezen előnyöket mindenképp érdemes laboratóriumi körülmények között különböző modellrendszereken tesztelni, hogy azok ipari megvalósításra kerülhessenek hatékony PAT eszközként.

**PALÁSTI DÁVID JENŐ**

*palastidavidjeno@outlook.com*

Vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezető:*

*Galbács Gábor*

*egyetemi docens, SZTE TTIK*

---

## **Lézer-indukált plazma spektroszkópiás adatok kiértékelése kukorica növények kvalitatív diszkriminációs analízise céljából**

*Kulcsszavak: elemanalízis; LIBS; többváltozós adatkiértékelés; kvalitatív analitikai spektroszkópia*

A kutatás során hétféle hibrid kukorica és hétféle termőterület kombinációjaként előálló, összesen 13 különböző típusú kukorica szemtermés mintát vizsgáltunk kétimpulzusos LIBS spektroszkópiával, egy hordozható műszer segítségével. Azt vizsgáltuk, hogy lehetséges-e alkalmas adatkiértékelési eljárással megbízhatóan különbséget tenni (diszkriminálni) a hibrid kukorica minták között. Eljárást fejlesztettünk ki – és ennek végrehajtására szolgáló kiértékelő programokat készítettünk – a reprezentatív LIBS spektrumok kiválasztására, a diszkriminációra legalkalmasabb spektrumvonalak megtalálására és a leghatékonyabb adat skálázási módszer meghatározására. Ötféle többváltozós statisztikai eljárást (korrelációs diagramok, főkomponens analízis, hierarchikus osztályozás, k-közép osztályozás és lineáris diszkriminancia analízis) próbáltunk ki nagyszámú (mintánként legalább ötven) spektrum kiértékelésére.

A kipróbált eljárások közül a legnagyobb pontosságú diszkriminációt a lineáris diszkriminációs analízissel értük el. Megfelelő adat-előkezelés révén ezzel a módszerrel legalább 60% pontossággal tudtuk osztályozni a kukorica szemtermés mintákat. Azt is megállapítottuk, hogy célszerű minél több változó (ezzel együtt minél több megfigyelés) bevonása a kiértékelésbe. továbbá rámutattunk arra is, hogy a szemtermések LIBS spektruma nem csak a kukorica fajtájától, hanem a termőterülettől is függ, ezért a megbízható, csak a szemtermés vizsgálatán alapuló diszkrimináció összetett feladatnak bizonyult.

A diszkrimináció pontosságának további javítására látunk lehetőséget, elsősorban a szélesebb (UV-Vis-NIR) és egyben jobb felbontású LIBS spektrumok felvétele révén, valamint a spektrális háttér hatékony korrekciója révén. A statisztikai adatkiértékelés oldaláról további kemometriai eljárások (pl. kvadratikus diszkriminancia analízis, Multilinear Curve Resolution Alternating Least Squares stb.) is bevonhatóak a kiértékelésbe, melyek egy része kombinálható is. Ezen lépések megvalósítását jelenleg is folyamatban van.

Végezetül szeretném felhívni a figyelmet arra is, hogy a szemtermések LIBS spektrumainak hasonlósága (diszkriminációjuk nehézsége) egyúttal azt is jelenti, hogy ezek a spektrumok "stabil" (nem változó) háttérrel szolgálnak a szemtermések felületén előforduló különböző szennyezők LIBS módszerrel történő kimutatására. Kutatásaink távlati célja éppen ennek megvalósítása, vagyis a jelen munka eredményei ebben a tekintetben kimondottan biztatóak.

**BRAUN ÁDÁM**

*braunadam@hotmail.com*

Kémia

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Braun Mihály*

*tudományos főmunkatárs, MTA Atommagkutató Intézet*

*Papp István*

*tudományos munkatárs, Isotoptech Zrt.*

---

## **Módszer fejlesztése felületek elemeloszlásának térképezésére lézer ablációs induktív csatolású plazma tömeg-spektrometriás (LA-ICP-MS) módszerrel**

*Kulcsszavak: LA-ICP-MS; képkalkotás; meteorit*

Kutatómunkám célja egy LA-ICP-MS képkalkotási módszer kidolgozása volt. A módszer fejlesztése során minden sarkalatos pontot érintettem a készülékek paramétereinek beállításától az adatfeldolgozásig. A lézerablációs és ICP-MS paramétereinek optimalizálását egyszerű geometriával és ismert elemeloszlással rendelkező tárgyakkal végeztem. A bonyolultabb, valós mintát reprezentáló vöröshagyma kálium térképének készítése során a képfeldolgozási folyamatot dolgoztam ki. A hosszadalmas adatrendezési és számítási problémák rövidítésére készítettem egy Windows alatt futó szoftvert, ami a mérési paraméterek megadása után közvetlenül az ICP-MS által szolgáltatott fájlokból képes az utómunkákhoz könnyen felhasználható formátumú fájl létrehozására.

A képkalkotó módszer képességeinek bemutatására két vizsgálatot végeztem. A módszerfejlesztés során elemzett elektronikai szerelőlapon található ólomról bebizonyítottam, hogy felületi szennyezés. A második alkalmazás a kabai meteorit részletes elemzése. Egy kondrumban található 16 elem eloszlását vizsgáltam meg. Az adatok sokváltozós statisztikai elemzésével és a sokváltozós adatok térbeli ábrázolásával sikerült ásványtani következtetéseket levonni a meteorit összetételét illetően. Az eredmények helyességét SEM-EDX mérésekkel igazoltam. Az EDX módszerrel megállapított koncentrációk segítségével Al, Ca, Mg, Fe, Si, és Na elemekre sikerült az LA-ICP-MS elem térképeket kalibrálni. A dolgozatban bemutatott módszerrel hasonló részletességű képeket kaptam, mint a  $\mu$ PIXE elemzéssel nyertek.



**VIG ÁRPÁD**

*vadarpa@gmail.com*

Kémia

BSc, 9. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Kuzmann Ernő*

*egyetemi magántanár, ELTE TTK*

---

## **Ón-oxiddal és ón-kloriddal dópolt szilikát üvegek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával**

*Kulcsszavak: Mössbauer-spektroszkópia; fotokatalitikus aktivitás; SnO és SnO<sub>2</sub>; szilikát üvegek*

A látható fény hatására aktiválható fotokatalizátorok alkalmazhatók szennyvíztisztítási célból. Hematittal adalékolt szilikátüvegekben megfigyelhető volt a látható fénnel indukált fotokatalízis, aminek az aktivitását sikerült növelni további fémoxidokkal való adalékolással. Fény hatására működő fotokatalízist SnO-t tartalmazó anyagokban is lehetett tapasztalni, aminek mértéke különbözött attól, hogy az ónoxid milyen környezetben volt.

A jelen kutatásban annak vizsgálata történt, hogy milyen módon építhető be az ón szilikátüvegekbe SnO illetve SnCl<sub>2</sub> prekursorokból úgy, hogy a maximális fotokatalitikus hatás legyen elérhető. Az <sup>119</sup>Sn Mössbauer-spektroszkópia egy kitűnő módszer a különböző óntartalmú specieszekben előforduló Sn mikrokörnyezetek illetve az ón vegyértékének a megkülönböztetésére, a vizsgálatok ezzel a módszerrel történtek. A munka során SnCl<sub>2</sub>-dal vagy SnO-dal adalékolt szilikátüvegekben elsődlegesen az <sup>119</sup>Sn Mössbauer-spektroszkópia segítségével kellett meghatározni az ón vegyértékét és mikrokörnyezetét a különböző hőmérsékleteken végzett hőkezelések során. A legfontosabb annak a megállapítása volt, hogy van-e korreláció a minták látható fény hatására bekövetkező fotokatalitikus aktivitása és az Sn<sup>II</sup> előfordulása között. A SnCl<sub>2</sub>-vel vagy SnO-dal adalékolt szilikátüveg mintákat a Tokiói Metropolitan Egyetemen állították elő szol-gél módszerrel majd ezt követően 300 °C -on illetve 500 °C-on hőkezelték. A minták <sup>119</sup>Sn Mössbauer-mérése szobahőmérsékleten és cseppfolyós nitrogén hőmérsékleten történt. A szobahőmérsékleti Mössbauer-spektrumok alapvetően az SnO<sub>2</sub>-nak megfelelő Sn<sup>IV</sup> dublettből álltak. Ugyanakkor, a 78 K-n mért Mössbauer-spektrumokban az Sn<sup>IV</sup> dublett mellett fellépett az Sn<sup>II</sup> spektrumjárulék is, ami az Sn<sup>II</sup> atomokat hasonló mikrokörnyezetekben jelezte, mint ami az SnO-ban fordul elő. Az Sn<sup>II</sup> relatív járulékában 78K-és 295 K-n tapasztalt nagy eltérések a különböző ón mikrokörnyezetekre jellemző Mössbauer-Lamb faktorok közötti különbségekkel és eltérő hőmérsékletfüggésével magyarázható. Azt találtuk továbbá, hogy az Sn<sup>II</sup> komponens relatív spektrumterülete az SnCl<sub>2</sub>-dal dópolt mintáknál mindig nagyobb volt mint a megfelelő SnO-val dópolt mintákénál, és a legnagyobb a 300 °C-on hőkezelt SnCl<sub>2</sub>-dal dópolt mintában - ami a legnagyobb fotokatalitikus aktivitással is rendelkezett - bizonyult. Ez azt mutatta, hogy korreláció van a minták látható fény hatására bekövetkező fotokatalitikus aktivitása és az Sn<sup>II</sup> előfordulása között.

**REHO DÓRA**

*reho\_dora@freemail.hu*

Vegyész

MSc, 2. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Braun Mihály*

*tudományos főmunkatárs, MTA Atommagkutató Intézet*

*Papp István*

*tudományos munkatárs, Isotoptech Zrt*

---

## **Platina izotóparány mérése lézer ablációs induktív csatolású plazma tömegspektrometriai (LA-ICP-MS) módszerrel**

*Kulcsszavak: platina; izotóparány; lézer abláció; ICP-MS*

Nagy tisztaságú platina minták izotóparány vizsgálatához fejlesztettem ki lézer ablációs induktív csatolású plazma tömegspektrometriás (LA-ICP-MS) módszert. A platina minták egy német kutatócsoporttól származnak, akik a  $^{190}\text{Pt}$  izotóp felezési idejét szeretnék meghatározni.

A tömegspektrometria leggyakrabban használt módszer az izotóparány-mérésre, köszönhetően nagy érzékenységének, precizitásának és kis mintaigényének. Ezek közül az elem- és izotópanalitikai területen egyre népszerűbb az induktív csatolású plazma tömegspektrometria. Lézer ablációs egységet alkalmazva a szilárd minták felülete közvetlenül vizsgálható, különösebb előkészítés nélkül.

A platinának hat természetes izotópja van, amelyek közül a  $^{190}\text{Pt}$  hosszú felezési idejű ( $\sim 10^{11}$  év) radioaktív izotóp, amit kormeghatározásra alkalmaznak. A stabil izotópjainak arányát környezetkémiai, geológiai és archeometriai kutatások során vizsgálják.

Dolgozatom célja platina minták izotóp-összetételének meghatározása volt. A platina hat izotópjának vizsgálata mellett a fő cél a  $^{190}\text{Pt}$  izotóp koncentrációjának kvadrupol tömegspektrométerrel történő minél pontosabb meghatározása volt.

Munkám során nagy tisztaságú platina minták szennyezőit is mérni tudtam. Főkomponens analízist alkalmazva jól láthatók az izotópeloszlások közötti különbségek. Standardként az IRMM-010-es mintát használtam. Főkomponens analízissel meg tudtam határozni a legtisztább platina mintát a vizsgált minták közül.

Lézer ablációs induktív csatolású plazma tömegspektrometriás módszert alkalmazva precíz izotóparány számításokat tudtam elvégezni. Eredményeimet más laboratóriumok által double spike multikollektoros ICP-MS-sel végzett mérések eredményei is alátámasztják.

**KOZMA JÓZSEF**

*kjoci17@gmail.com*

Vegyésmérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Bitter István*

*ny. egyetemi tanár, BME VBK*

*Bojtár Márton*

*doktoráns, BME VBK*

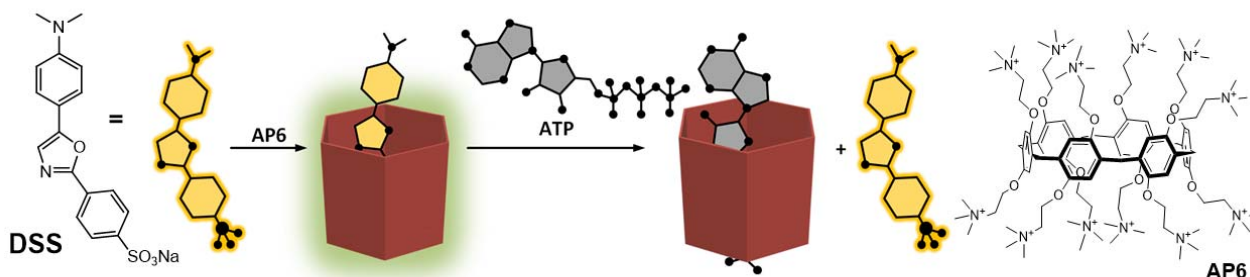
---

## **Újfajta makrociklusos receptorok: pillérarén-alapú kemoszenzor az adenosin-5'-trifoszfát szelektív detektálására**

*Kulcsszavak: szupramolekuláris analitikai kémia; pillérarén; kemoszenzor; nukleotid*

A szupramolekuláris analitikai kémia fontos területe az indikátorkiszorításon alapuló kemoszenzorok fejlesztése. Ezekben kiemelkedő szerepük van a makrociklusos vegyületeknek, melyek már a szupramolekuláris kémia megjelenése óta igen fontosak a szintetikus receptorok körében. Kemoszenzorként történő alkalmazásukhoz szükség van egy detektálható jelre, ami gyakran a fluoreszcencia. Mivel a makrociklusok jelentős része nem fluoreszkál, egy fluoreszcens indikátormolekulára is szükség van az analitikai detektálásához.

A pillér[n]arének n darab ( $n=5,6,\dots$ ) hidrokinon egységet tartalmaznak, melyeket metilén-hidak kötnek össze para-helyzetben. Egyszerű szintézisük és széleskörű gazda-vendég tulajdonságaik ellenére ritkán alkalmazzák őket szupramolekuláris analitikai rendszerekben. Munkám során vízdoldható, kationos pillér[6]arének szintézisét tűztam ki célul, amelyek 12 ammónium végcsoportot tartalmaznak (AP6), és mint lehetséges nukleotid szenzorok jönnek számításba indikátor-kiszorítás elvén működő rendszerekben. Ehhez anionos fluoreszcens indikátormolekulákra van szükség, mint a pyranine és a dapoxyl-szulfonsav Na-só (DSS), amelyek előzetes vizsgálataim alapján komplexet képeznek a pillér[6]arénnel. Az így kapott rendszer fluoreszcens kemoszenzorként alkalmazható az adenosin-5'-trifoszfát (ATP) szelektív detektálására egyéb nukleotidokkal szemben.





## **Analitikai kémia II.**



**MÁTÉFFY KORNÉL**  
*mateffykornel@gmail.com*  
Analitikai kémia  
MSc, 2. félév  
Újvidéki Egyetem

*Témavezető:*  
*dr. Vastag Gyöngyi*  
*egyetemi tanár, Újvidéki Egyetem*

---

**A fordított fázisú rétegekromatográfia lehetséges alkalmazása a kiválasztott arylazo-pirimidin festékszarmazékok retenciós viselkedésének tanulmányozásában**

*Kulcsszavak: arylazo-pirimidin festékek; RP-TLC; lipofilitás; többváltozós módszerek*

Fordított fázisú rétegekromatográfia alkalmazásával, RPTLC C18/UV<sub>254s</sub> kivizsgálásra került az arylazo-pirimidin festékek retenciós viselkedése két szerves módosító, protikus n-propanol és aprotikus aceton jelenlétében.

Kivizsgálásra került az –R szubsztituensek természetének illetve a szerves módosítók hatása a vizsgált származékok retenciós képességére. Az arylazo-pirimidin kromatográfiás paraméterei,  $R_M^0$  és  $m$ , illetve a számítások által kapott megoszlási koeficiensei,  $\log P$ , közötti lineáris regresszió analízis segítségével megvalósított összehasonlítás során lineáris összefüggés állapítható meg. A szubsztituensek hatása a vizsgált származékok lipofilitására, valamint a különböző módon kapott lipofilitási paraméterek összehasonlítása többváltozós módszerek alkalmazásával is megtörtént, mint amilyen a klaszter- és a főkomponens analízis. Mindkét alkalmazott módszer hasonló eredményeket adott, amelyek összhangban vannak a lineáris regressziós analízissel kapott eredményekkel, így hát bebizonyosodott, hogy a fordított fázisú rétegekromatográfia sikeresen alkalmazható az arylazo-pirimidin származékok lipofilitásának meghatározására.

**HORVÁTH SZABOLCS**

*horvat92@gmail.hu*

Vegyész

MSc, 4. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Horváth Krisztián*

*egyetemi docens, PE MK*

*Farsang Evelin*

*PhD hallgató, PE MK*

---

### **Axiális hőmérséklet gradiens hatása folyadékkromatográfiás elválasztások hatékonyságára**

*Kulcsszavak: adiabatikus körülmények; egyensúlyi-diszperzív modell; Martin-Synge algoritmus; tömegmérleg egyenlet; súrlódási hő*

Az axiális hőmérséklet gradiens kromatográfiás hatékonyságra gyakorolt hatását adiabatikus körülmények között modelleztük. A számításokhoz a kromatográfia egyensúlyi-diszperzív modelljét alkalmaztuk. A modellt kibővítettük az axiális hőmérséklet gradiens figyelembevételével. Az eredményekből látható, hogy a hőmérséklet gradiens miatt retenció és vándorlási sebesség gradiens lép fel az oszlopban. Mivel a retenció tényező az oszlopban nem konstans, ezért az nem számolható ki, mint a nettó retenció idő és a holt idő aránya. A vándorlási sebesség fokozatos növekedésének eredményeként, a komponensek retenció ideje csökken a hőmérséklet növekedtével. Emellett, az oszlopban a komponens sávjának frontja nagyobb sebességgel halad, ami további sávszélesedést okoz. Nagyobb hőmérsékletváltozásnál nagyobb a sávszélesedés. Ugyanakkor a komponens oszlopból való kilépésének sebessége a  $\Delta T$  növekedtével nő. Következésképpen, egy látszólagos csúcskompresszió miatt keskenyebb lesz a sáv. A két ellentétes hatás (sávszélesedés, csúcskompresszió) eredményeképp az oszlop hatékonysága nem változik meg jelentősen a hőmérséklet gradiens hatására.



**HEGEDÜS ESZTER**

*hege.eszti@gmail.com*

Biomérnöki

MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Fekete Jenő*

*professor emeritus, BME VBK*

*Dr. Bobály Balázs*

*egyetemi adjunktus, BME VBK*

---

### **DJ-1 fehérje oxidált variánsainak vizsgálata fordított fázisú folyadékkromatográfiás módszerrel**

*Kulcsszavak: oxidatív stressz; neurodegeneratív betegségek; Parkinson-kór; HPLC; MS*

A DJ-1 fehérje az emberi szervezet szinte minden sejtjében expresszálódik. Fontos szerepet tölt be az oxidatív stressz elleni védelemben, ebből következően az oxidatív stressz által okozott neurodegeneratív betegségekkel szembeni küzdelemben is. Napjainkban közel 10 millió ember szenved Parkinson-kórban, melynek minél korábbi diagnosztizálása, esetleges gyógyítása az orvostudomány egyik égető kérdése. A DJ-1 fehérje vizsgálata ezért kiemelkedően fontos, mivel oxidációjának mértéke összefüggésbe hozható ilyen jellegű betegségek kialakulásával, kulcs szerepet tölthet be a diagnosztizálásban és a gyógyszerjelölt molekulák vizsgálatában is. Vizsgálataink céljából ezért elsősorban a DJ-1 fehérje oxidált variánsainak részletes vizsgálatát tűztük ki.

Munkánk során fordított fázisú folyadékkromatográfiás módszert fejlesztettünk ki a fehérje oxidált variánsainak elválasztására. Megvizsgáltuk a DJ-1 fehérje viselkedését oxidatív körülmények között, az agyban lezajló oxidatív folyamatok modellezésére.  $H_2O_2$ -vel kezeltük a mintákat, és vizsgáltuk az oxidációs folyamatok hatását. A kifejlesztett kromatográfiás módszert tömegspektrometria-kompatibilis módszerre dolgoztuk át, hogy az oxidált variánsokról tömeginformációt is kaphassunk. Ennek során kiváztottuk azt a mozgófázis additívet, mely az MS érzékenységet rontaná. Kromatográfiás méréseink során egymástól jól elváló csúcsokat tapasztaltunk, így elmondható, hogy az általunk használt módszer alkalmas a DJ-1 fehérje különböző oxidációs állapotainak elválasztására, a módszer érzékeny tömegspektrometriás detektálást tesz lehetővé. A folyadékkromatográfiás mérések mellett elvégeztünk kifelbontású tömegspektrometriás méréseket is, melyek során valószínűsíthetjük, hogy a folyadékkromatográfiás csúcsok valóban különböző mértékben oxidált fehérje variánsok.

Partnerünk a módszer segítségével gyógyszerjelölt molekulák DJ-1 fehérjén kifejtett oxidatív stressz elleni védőfunkcióját vizsgálja.

**SZAKOLCZAI ANETT**

*anett931010@gmail.com*

Vegyésmérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dorkó Zsanett*

*PhD hallgató, BME VBK*

---

## **Gyenge savak és gyenge bázisok kölcsönhatása nemvizes közegben**

*Kulcsszavak: sav-bázis egyensúly; molekuláris lenyomatú polimerek; konduktometria; aprotikus közeg; prepolimerizációs elegy*

A kutatócsoport, amelyben dolgozom, évek óta foglalkozik molekuláris lenyomatú polimerekkel, röviden MIP-ekkel. A MIP-ek készítése során gyengén savas jellegű molekula lép kapcsolatba gyengén bázikus jellegű molekulával aprotikus közegben. A két komponens közül az egyik, például a sav, egy monomer. A monomer polimerizációja során a köztük kialakult kölcsönhatás rögzítődik és többek közt ez felelős azért, hogy a képződő polimerben kialakul a bázis molekuláris lenyomata.

Munkám során gyenge savak és gyenge bázisok kölcsönhatásával foglalkoztam nemvizes közegben, mivel ez a jelenség fontos a MIP-ek működésének megértéséhez. Konduktometriás méréseink során megfigyeltük, hogy a gyenge savak és gyenge bázisok reakciója más aprotikus közegben, mint vízben, hiszen a várt 1:1 arány helyett más sztöchiometriai arányokban képeznek komplexet. A kialakult komplexek részleges ionos disszociációja miatt az oldatuk vezeti az áramot. Több sav-bázis pár esetén a kitüntetett sztöchiometriai arány a 4:1 sav-bázis arány volt, amely valószínűleg stabilabb, mint az 1:1 illetve a 2:1 sav-bázis arányú komplex. Ez a következtetés összhangban van azzal, hogy azok a MIP-ek bizonyultak a legjobb tulajdonságúnak, amelyek a gyengén savas jellegű monomert és a gyengén bázikus jellegű reakciópartnert 4:1 arányban tartalmazzák.

Tanszékünk kvantumkémiai csoportjában elvégzett számítások azt mutatják, hogy ha több molekula savat adunk egy molekula bázishoz, akkor stabilabb komplex keletkezik, mint egyetlen savmolekulával. Ezen komplex inkább ionpár, mint hidrogénhidas komplex. Ez okozhatja a disszociációt, aminek köszönhetően vezet az elegy. Valószínű, hogy ez az ionpár képződés áll az imprintelés hátterében is.

**NAGY CYNTHIA NÓRA**  
*nagy.cynthianora@gmail.com*  
Kémia  
BSc, 5. félév

Debreceni Egyetem  
Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezetők:*  
*Kecskeméti Ádám*  
*PhD hallgató, DE TTK*  
*Dr. Gáspár Attila*  
*egyetemi docens, DE TTK*

---

### **Könnyminták tripszines emésztése mikrofluidikai enzimreaktoron**

*Kulcsszavak: proteomika; peptidtérkép vizsgálat; immobilizálás; adszorpció; kapilláris zónaelektroforézis*

Munkánk során olyan mikrofluidikai csipet fejlesztettünk ki, mely alkalmas könnyminták fehérjetartalmának gyors és hatékony emésztésére. A mikrocsip kialakítása lehetővé teszi azt, hogy egyszerre akár 8 könnyminta emésztése is végrehajtható legyen. A mikrocsipek anyaga poli-(dimetilsziloxán) (PDMS), mely egy kiváló porózus adszorbens, a nagyméretű fehérjéket erősen tudja adszorbeálni. A mikrofluidikai csipek szerpentin alakú csatornáin tripszin enzimet immobilizáltunk spontán adszorpció révén. A felületen megkötött tripszint nagy koncentrációban alkalmazva elértük azt, hogy nagyságrendnyi reakcióidőbeli csökkenés mellett ugyanolyan hatékony fehérjeemésztés valósuljon meg, mint a standard, oldatban történő emésztés esetén. Az oldatban való emésztés ugyanis akár 16 órát is igénybe vehet, míg a reaktoron való emésztés esetén a reakcióidő csupán 0,014 óra (50 másodperc). Az emésztett könnymintákat kapilláris zónaelektroforetikus módszerrel (CZE) elemeztük. A kapott elektroferogram az adott minta peptidtérképe, mely ujjlenyomatszerűen jellemezni a mintában található fehérjéket. A peptidtérképek összehasonlításával kapott eredmények alapján megállapítható, hogy a kialakított mikrofluidikai enzimreaktor megbízható emésztést tesz lehetővé, illetve, hogy a különböző személyektől származó könnyminták fehérjeösszetétele eltérhet egymástól.

**TÓTH GÁBOR**

*chemgabe93@gmail.com*

Vegyésmérnöki

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Ozohanics Oliver*

*tudományos munkatárs,*

*MTA TKK, MS Neuroproteomika Csoport*

---

## **Saját töltésű kapilláris HPLC kolonnák készítése proteomikai célokra**

*Kulcsszavak: nanoHPLC; tömegspektrometria; kromatográfia; peptid*

Napjainkban egyre elterjedtebb a saját töltésű kapilláris HPLC kolonnák használata. Egyszerűsége, gazdaságossága, és a töltetek széleskörű variálási lehetőségei miatt szinte elengedhetetlen a proteomikában vizsgált komplex mintákhoz. Ennek segítségével a kereskedelmi forgalomban nem elérhető méretű vagy töltetű oszlopok használatára is lehetőség nyílik.

Munkám során célul tűztem ki proteomikai elválasztásokra alkalmas fordított fázisú kapilláris kolonnák készítését, a töltési paraméterek széleskörű optimalizálásával, valamint élettartam vizsgálattal. A vizsgálatok során kifejlesztettünk egy módszert 2,6 µm szemcseátmérőjű XB-C<sub>18</sub> töltetek 100 µm belső átmérőjű kapillárisba töltésére. Optimaltunk a kapillárist lezáró frit elkészítését és a kolonnatöltés kiválasztott paramétereit. Fontos paraméternek tekintettük a töltetszuspenzió töménységét, ezzel összefüggésben a töltési időt is, emellett vizsgáltuk a töltéshez használt gáz nyomását. Az így kapott kapilláris kolonnák kromatográfiai paraméterei kiemelkedően jó reprodukálhatósággal jellemezhetők, keskeny csúcsokat és jó elválást lehet rajtuk elérni. Emellett a retenciós időkből nem mutatkozik számottevő átlagos csúszás (<0,075 perc), így a méréseink jól reprodukálhatóak (RSD<1,1%). Az általunk készített kolonnák reprodukálhatóságának vizsgálatát enoláz standard triptikus emésztményének elválasztásával végeztük. Emellett elvégeztük a kolonnák összehasonlítását hasonló típusú gyári oszloppal.

α-1-savas glikoprotein elválasztásával vizsgálatokat végeztünk a kolonnákon való csúcscsúszás jellemzésére is. Kiemelkedő eredményként a saját töltésű kolonna használatával sikerült megvalósítanunk glikopeptidek izomereinek elválasztását.

A módszer használhatóságának jellemzésére két gazdaságossági paramétert használhatunk: a kolonnák élettartamát, valamint a költséghatékonyságot. Hozzávetőleges számításokat végeztem, melyek során az egy oszlopra eső fajlagos költséget hasonlítom össze hasonló típusú gyári kolonna beszerzési költségével.

**FÜREDI ADRIENNE**

*siesou.94@gmail.com*

Biomérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Fürjes Péter*

*tudományos főmunkatárs, MTA EK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet*

*Dr. Wunderlich Lívius*

*egyetemi adjunktus, BME VBK*

*Holczer Eszter*

*tudományos segédmunkatárs, MTA EK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet*

---

### **SELEX eljárásban alkalmazható magnetoforetikus részecske szeparáció és csapdázás mikrofluidikai rendszerekben**

*Kulcsszavak: aptamer; mágneses gyöngyök; mikromágneses szeparátor; mikrofluidika*

Napjainkban a diagnosztikai eljárások döntő része egy adott fehérje molekula detektálásán alapul, melyekhez általában az adott molekulához specifikusan és nagy affinitással kötődő ellenanyagokat alkalmaznak receptorként. Az ellenanyagok lehetséges alternatívái lehetnek a kismolekulákat, fehérjéket szelektíven felismerő szintetikus oligonukleotid molekulák, az aptamerek. Előállításuk in vitro módszerrel, az ún. SELEX (Systematic Evolution of Ligands by Exponential Enrichment) eljárás segítségével megvalósítható, mely azonban idő és költség igényes folyamat. Az eljárás egyes lépéseinek mikrofluidikai környezetbe való átültetésével, a mikrofluidikai SELEX (mSELEX) módszer segítségével a minta és reagens igény, valamint a szelekciós idő és szelekciós körök száma is drasztikusan csökkenthető. A módszer alkalmazásával lehetőség nyílik olyan hordozható eszközök létrehozására melyen az aptamer szelekció gyorsan és olcsón, nagy hatékonysággal elvégezhető.

Munkám során a SELEX eljárásban gyakran alkalmazott magnetoforetikus szeparáció mikrofluidikai környezetben történő adaptálása, vizsgálata és optimalizálása volt a cél. Ferromágneses (FeNi) mikrostruktúra mikrofluidikába történő beágyazásával a mágneses tér laterális eloszlása megfelelően módosítható, lokalizálható, így precízen és automatikusan manipulálható már kis mennyiségű mágneses gyöngy is a magnetoforetikus jelenségek kihasználásával. A vizsgált mikrofluidikai struktúrákat a hagyományos mikrogépészeti és soft litográfias módszerek kombinálásával alakítottam ki heterogén, üveg-polimer (PDMS, poli-dimetil-sziloxánban) rendszerben. Az egyes rendszerek szeparációs és csapdázási paramétereit, valamint hatékonyságát superparamágneses gyöngyök viselkedésének elemzése alapján jellemeztem. Tapasztalataimra alapozva javaslatot tettem egy hatékony magnetoforetikus mikrofluidikai szeparációs (MMS) geometriára.

**BARTAL ATTILA**

*bartaloszi@gmail.com*

Vegyész

MSc, 4. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezető:*

*Szekeres András*

*tudományos főmunkatárs, SZTE TTIK*

---

## **Új, centrális glutaminsavat tartalmazó surfactin molekulák detektálása HPLC-ESI-IT-MS analízissel**

*Kulcsszavak: gyűrűs lipopeptid; folyadékkromatográfia; tömegspektrometria; fragmentáció; peptidszekvencia*

A surfactinok gyűrűs lipopeptid típusú biológiai felületaktív anyagok, melyek egy változó lánchosszúságú  $\beta$ -hidroxizsírsavból és egy hét aminosavból álló peptidgyűrűből épülnek fel, ezeket egy laktonhíd kapcsolja össze, létrehozva így a peptidlánc gyűrűs szerkezetét. Az elsőként azonosított surfactin molekulában a heptapeptid aminosav szekvenciája Glu-Leu-Leu-Val-Asp-Leu-Leu, melyben később a kutatók Leu/Val, Ala/Val, Ile/Val, valamint Ile/Leu cseréket fedeztek fel a második, negyedik és hetedik pozíciókban, az alifás szénlánc hosszát pedig C12 – C15 között figyelték meg. Ezeket a vegyületeket főként a *Bacillus* faj termeli és számos biológiai aktivitással rendelkeznek, többek között antivirális és gyulladáscsökkentő hatásuk is van.

A *Bacillus subtilis* SZMC 6179J törzsből extrahált surfactin vegyületek keverékét vizsgáltuk HPLC-ESI-IT-MS technikával annak érdekében, hogy az elegy nagyobb moláris tömegű komponenseit el tudjuk választani, és hogy azok szerkezetét jellemezhessük. A sikeres elválasztás után az 1072 – 1114 m/z értékű nátrium adduktként ( $[M+Na]^+$ ) detektált prekursor ionok MS2 spektrumainak vizsgálata során a surfactinok egy eddig ismeretlen csoportját fedeztük fel, melyben a heptapeptid ötödik pozíciójában aszparaginsav helyett glutaminsav található. Az újonnan azonosított változatok fermentáléban levő relatív mennyiségét vizsgálva azt tapasztaltuk, hogy a kiválasztott mikroorganizmus által az összesen termelt és azonosított surfactin molekulák több mint 60%-át teszik ki a centrális glutaminsavval rendelkező vegyületek. A kromatográfiásan sikeresen elválasztott legnagyobb, 1114 m/z értékkel jellemezhető surfactinok között ez a variáns kb. 98%-ban található meg, amely a jövőben lehetőséget nyújthat a vegyület preparatív tisztítására, valamint eddig ismeretlen biológiai hatásainak tanulmányozására.

# **Anyagtudomány I.**





**BARABÁS JÚLIA**

*julia.barabas92@gmail.com*

Vegyésmérnöki

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Hóltzl Tibor*

*fejlesztőmérnök, FETI Kft.*

---

### **Aranyklaszterrel érzékenyített titán-dioxid bevonat: A jövő napeleme?**

*Kulcsszavak: számításos kémia; titán-dioxid klaszter; foszforeszcencia; tervezés; optikai tulajdonságok*

Napjainkban egyre fontosabbá válik az, hogy olyan technológiák kerüljenek kidolgozásra, amelyek segítségével kiszolgálhatóvá válik az emberiség folyamatosan növekedő energiaigénye, illetve amelyekkel kiválthatók hagyományos energiaforrásaink. Ezen megújuló energiaforrások egyike a Nap, melyet többek között napelem segítségével hasznosíthatunk.

A nanotechnológia segítségével számos új, különleges és ami a legfontosabb, tervezhető tulajdonságú anyag hozható létre. A számítástechnika fejlődésével a nanoméretű rendszerek különleges tulajdonságainak modellezését, mélyebb megértését és tervezését lehetővé tevő kvantumkémiai számítások is elvégezhetőek ebben a mérettartományban.

Munkám célja fémklaszterekkel érzékenyített titán-dioxid bevonatok előállítását volt, melyhez mind elméleti, mind pedig kísérleti módszerek széles skáláját alkalmaztam.

A sűrűségfukcionál elméleten alapuló (DFT) számítások során két, különböző elemszámú titán-dioxid klasztert, aranyklasztereket, illetve titán-dioxid – arany klasztereket építettem, majd elvégeztem geometriai optimalizációjukat.

A további számítások során kapott eredmények azt mutatták, hogy a tíz elemből álló titán-dioxid klaszter esetében stabilabb klasztereket kaptam, mint a hat titán-dioxid egységből álló klasztereknél. A Häkkinen által publikált „divide and protect” elv itt is beigazolódott, az oxigénhez kötődő aranyatomok oxidált állapotba kerültek, míg a titánhoz kapcsolt, illetve a klaszter belső részét alkotó atomok töltése semleges maradt. A gerjesztési energiák számítása során kapott eredmények azt mutatták, hogy az első gerjesztett állapot minden esetben triplált állapotú. Az aranyból a jelentős relativisztikus hatások miatt ez felveti a foszforeszcencia lehetőségét.

Mivel a fémklaszterek abszorpciós spektruma a méret függvényében változik, ezért a kolloidkémiai módszerek használata során fő célom az volt, hogy olyan titán-dioxid vékonyréteget állítsak elő, amely szabályozható méretű aranyklasztereket tartalmaz. A készített vékonyrétegek vastagságának meghatározásának céljából UV-Vis spektrumokat vettem fel, emellett fluoreszcenciás és foszforeszcenciás méréseket végeztem, melyek célja az aranyklaszterek méretének összehasonlítása volt. Megfigyelésem alapján különböző templátanyagokkal különböző méretű aranyszemcsék állíthatók elő. Az emissziós spektrumon a 0,03 ms-os késleltetési idő beállításával kapott sávok azt mutatják, hogy az arany foszforeszcencia tulajdonságokkal rendelkezik.

**FÓNAGY PÉTER**

*peti1995@freemail.hu*

Vegyésmérnök

BSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Hórvölgyi Zoltán*

*egyetemi tanár, BME VBK*

---

### **Fotoaktív szol-gél bevonatok előállítása és jellemzése**

*Kulcsszavak:  $\text{TiO}_2$ ;  $\text{ZnO}$ ; vékonyréteg; ezüst; színezék-degradáció*

A  $\text{TiO}_2$  és  $\text{ZnO}$  félvezető oxidok fotooxidatív katalizátorként használhatóak. A fotokatalízis legígéretesebb felhasználási módja a heterogén katalízis, por vagy vékonyréteg formájában. A  $\text{TiO}_2$  és  $\text{ZnO}$  rétegek könnyen létrehozhatóak, változatos felületeken, változatos tulajdonságokkal. Az ilyen heterogén katalizátorokat könnyű kezelni és a megfelelő feladatra optimalizálni.

Munkám célja a félvezető oxidok pórusaiba impregnált színezékek fotooxidációjának vizsgálata, ez alapján a félvezetők és a gerjesztett színezék molekulák kölcsönhatásainak jellemzése.  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZnO}$ ,  $\text{TiO}_2$ - $\text{ZnO}$  kompozit, és ezüsttel módosított  $\text{TiO}_2$  rétegeket hoztam létre szol-gél mártásos (dip-coating) technikával. Ezek fotoaktivitását, optikai jellemzőit, rétegvastagságát és porozitását vizsgáltam. Vizsgáltam színezékek adszorpcióját a rétegek pórusrendszerében illetve ennek befolyásoló tényezőit is.

A rétegekbe diffundáló  $\text{Na}^+$  ionok csökkentik a fotoaktivitást, ezért védőrétegnek kompakt  $\text{SiO}_2$  réteget alkalmaztam. Vizsgáltam a védőréteg hatását a fotoaktivitásra, rétegvastagságra és porozitásra.

A fotoaktivitást UV és látható fényben is vizsgáltam. A vizsgálatok során a réteg pórusrendszerében vizes oldatból adszorbeált színezék bomlását követtem nyomon. Kiegészítő vizsgálatként színezék oldatba helyeztem rétegeket és így világítottam be őket.

Munkám során kimutattam a védőréteg kedvező hatását a fotoaktivitásra, az ezüstözött rétegek előnyös fotoaktív tulajdonságait, a pH hatását a színezékek felszívódására és a rodamin 6G színezék érzékenyítő hatását  $\text{TiO}_2$  rétegekben. A megvizsgált  $\text{ZnO}$  és  $\text{TiO}_2$ - $\text{ZnO}$  kompozit rendszerek alapján megállapítottam, hogy ezek fotoaktivitása elmarad a tiszta  $\text{TiO}_2$  aktivitásától.

**KÉRI ORSOLYA**

*orsolyakeri@gmail.com*

Vegyésmérnöki

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Szilágyi Imre Miklós*

*tudományos munkatárs, BME VBK*

---

### **Fotokatalitikus mag-héj nanokompozitok**

*Kulcsszavak: fotokatalízis; félvezető-oxid; polimer; nanoszemcse; atomi rétegleválasztás*

A fotokatalizátorok felhasználhatóak többek között vízfertőtlenítésre, szerves szennyezők oxidálására, öntisztuló bevonatok előállítására napenergia alkalmazásával. A kristályos titán-dioxid egy széles körben alkalmazott fotokatalizátor, azonban közismert, hogy amorf formában nincsen fotokatalitikus aktivitása. Nemrég viszont azt találták, hogy az atomi rétegleválasztással (ALD) előállított amorf  $\text{TiO}_2$  mégis mutathat valamennyi aktivitást. Az ALD során az egymást követő felület-kontrollált reakcióknak köszönhetően a vékonyfilmek növesztése gázfázisból nanométer pontossággal lehetséges.

A munkám során ALD-vel nanoszemcsékre leválasztott amorf és kristályos  $\text{TiO}_2$  fotokatalitikus tulajdonságait tanulmányoztam. Referenciaként a  $\text{TiO}_2$  mellett ALD-vel előállított amorf  $\text{Al}_2\text{O}_3$  és kristályos  $\text{ZnO}$  bevonatot is vizsgáltam, valamint szol-gél módszerrel leválasztott  $\text{TiO}_2$ -ot. A rétegek  $\text{SiO}_2$  és PMMA (poli-(metil-metakrilát)) nanoszemcsékre lettek leválasztva. A hordozók kiválasztásánál az elsődleges szempont az volt, hogy ne legyenek hatással a  $\text{TiO}_2$  aktivitására, ne jöjjön létre a fényindukált töltések (e- és h+) szétválása a rétegek között.

A 100-150 nm átmérővel rendelkező Stöber szilika szemcsék bázis katalizált hidrolízissel lettek előállítva, míg az 50-100 nm átmérőjű PMMA szemcsék emulziós polimerizációval lettek szintetizálva. A  $\text{TiO}_2$  ALD-vel történő leválasztása 80 °C és 300 °C-on történt, titán-izopropoxid és víz prekursorokból. Az  $\text{Al}_2\text{O}_3$  trimetil-alumínium, a  $\text{ZnO}$  pedig dietil-cink és víz prekursorokból lett leválasztva 80 °C és 250 °C-on is. A szol-gél módszerrel előállított  $\text{TiO}_2$  tetra-n-butyl-ortotitanát és etanol prekursorokból lett előállítva. Mind a tiszta  $\text{SiO}_2$  és PMMA, mind a mag-héj szerkezetű nanokompozitokat megvizsgáltam SEM-EDX, TEM, FT-IR és XRD módszerekkel. Végül az előállított szemcsék fotokatalitikus aktivitását mértem meg. A fotokatalitikus reakciókat metil-narancs festék bomlásán keresztül vizsgáltam, amit UV-Vis spektrométerrel követtem nyomon. Az ALD-vel előállított  $\text{TiO}_2$  80 °C-on amorf, 300 °C-on pedig kristályos volt, az  $\text{Al}_2\text{O}_3$  mind 80 °C, mind 250 °C-on amorf, míg a  $\text{ZnO}$  mindkét hőmérsékleten kristályos volt. A  $\text{SiO}_2$  és PMMA szemcséket sikerült teljesen bevonni a leválasztott oxidokkal. A mérések eredménye szerint valóban volt fotokatalitikus hatása a  $\text{SiO}_2$ -ra és PMMA-ra leválasztott amorf  $\text{TiO}_2$  rétegnek, nemcsak a kristályosnak; az  $\text{Al}_2\text{O}_3$  nem volt aktív; a  $\text{ZnO}$ , valamint a szol-gél módszerrel előállított  $\text{TiO}_2$  jó fotokatalitikus aktivitást mutatott.

**FERTIG DÁVID**

*exoldaangeratti@gmail.com*

Vegyész

MSc, 3. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Horváth Erzsébet*

*egyetemi tanár, PE MK*

*Szabó Péter*

*tanszéki mérnök, PE MK*

---

### **Kaolinit agyagásványok fotofizikai és fotokémiai vizsgálata**

*Kulcsszavak: fotokatalízis; félvezető jelleg; nanostruktúrák*

A homogén és heterogén fotokatalízis rendkívül intenzíven kutatott terület szennyezőanyagok gáz- vagy folyadékfázisból történő eltávolítására. Az agyagásványok félvezető jellegükből adódóan fotokémiai aktivitással rendelkeznek, amelyet szilárd fázisú fotokatalízis során is megőriznek. A fotoaktivitást Si-tetraéder (T) és Al-oktaéder (O) rétegekből álló 1:1, vagy TO típusú kaolinitokra vizsgáltam. A kaolinitok delaminációjának eredményeként a fotokémiai aktivitás jelentős mértékben megnő. A jelenség nemcsak a kristályszerkezetben és/vagy az ásványos fázisban szennyezőként jelenlévő fotoaktív komponensek (pl. Fe- vagy Ti-oxidok) delaminációt követő diszperz eloszlásával és a megnövekedett fajlagos felülettel magyarázható. Az aktivitás inkább a félvezető jelleggel van összefüggésben, amelyet több oldalról szükséges vizsgálni.

A delaminált kaolinitok fotokémiai természetének felderítésére UV-Vis elnyelési és fluoreszcenciás spektroszkópiai módszert használtam. A kezeletlen, ún. book-type morfológiájú és a felületkezelt/delaminált kaolinitok UV-Vis emissziós spektruma a gerjesztési hullámhossztól függetlenül megegyezik, az egyetlen különbség az emissziós sávok intenzitásának eltéréséből származik. Feltételezem, hogy a vezetési- és a vegyértéksáv között lokális gerjesztett állapotok vannak jelen. A gerjesztett állapotok élettartamát meghatározva megállapítható, hogy ezek a köztes reaktív állapotok felelősek lehetnek-e a megnövekedett fotokémiai aktivitásért. A delaminációs folyamat az alumínium-oktaéderek torzulásával, valamint a morfológia megváltozásával jár. Kiemelendő, hogy a morfológia és a felületi tulajdonságok között szoros összefüggés van. A hatos koordinációjú alumínium mellett megjelennek normál körülmények között instabil négyes és ötös koordinációk is. Ezeket a reaktívnak feltételezett centrumokat az agyagásvány új morfológiája stabilizálja.

A katalitikus aktivitást a félvezető jelleg, valamint a delaminációt követő morfológia változás és az aktív helyek minőségi és mennyiségi változása együttesen határozzák meg. A felület érzékenyítésével (pl. Ag-nanorészecskék deponálásával) az aktivitás tovább növelhető. Delaminált kaolinitok felületén oxálsav modellvegyület bomlását 365 nm besugárzás mellett FT-IR/ATR spektroszkópiai módszerrel követtem nyomon.

**HAMPEL BOGLÁRKA**

*hampelboglark@yahoo.com*

Kémia

BSc, 4. félév

Babeş-Bolyai Tudományegyetem

*Témavezetők:*

*dr. Kovács Gábor*

*tudományos kutató, RO BBTE*

*dr. Csavdári Alexandra*

*egyetemi docens, RO BBTE*

---

**Kereskedelmi titán-dioxidok fotokatalitikus aktivitásának és hidrogénfejlesztő képességének finomhangolása arany és platina nanorészecskék együttes alkalmazásával**

*Kulcsszavak: hidrogénfejlesztés; UV fény; fotokatalízis; Au-Pt-TiO<sub>2</sub> tercier kompozitok*

A 21. század egyik legjelentősebb problémája a természetes vizeink szennyezése. A fotokatalízis, mint tudományág egyre inkább kutatott terület, amely egy alternatív lehetőséget kínál a szerves szennyezők lebontására. A fotokatalizátorok segítségével, fény jelenlétében a szerves szennyezőanyagok lebonthatóak H<sub>2</sub>O-re és CO<sub>2</sub>-ra. A fotokatalizátorok ugyanakkor egy alternatív eljárást jelenthetnek H<sub>2</sub> előállítására, amely igen fontos energiaforrás.

Kutatásunk során tercier kompozit fotokatalizátorokat állítottunk elő három kereskedelmi titán-dioxidból (Evonik Aeroxide P25, Aldrich anatáz, Aldrich rutil) és két nemesfémről (Au, Pt). Figyelembe vettük az Au és a Pt leválasztási sorrendjét, arányukat a kompozitban valamint az alkalmazott redukció típusát (in situ vagy impregnálás). A kompozitok szerkezeti és optikai tulajdonságait felderítettük (TEM, HR-TEM, EDX, DRS és XRD segítségével), majd a fotokatalitikus aktivitásukat vizsgáltuk oxálsav és szalicilsav bontására és hidrogén fejlesztésére UV fény hatására.

**SOMOSI ZOLTÁN**

*somosiz@invitel.hu*

Vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Pálinkó István*

*egyetemi tanár, SZTE TTIK*

*Muráth Szabolcs*

*PhD hallgató, SZTE TTIK*

---

### **Magnézium-alumínium réteges kettős hidroxidok delaminációja és visszarendezése szerves közegben**

*Kulcsszavak: réteges kettős hidroxid; delamináció; részecskeméret; ioncsere*

Tudományos diákköri munkám során magnéziumot és alumíniumot tartalmazó réteges kettős hidroxidok delaminációját és visszarendezésnek lehetőségét térképeztem fel szerves közegben. Az együttes lecsapás módszerével előállított módosítatlan, valamint direkt ioncserével készült, tenzidanionokat tartalmazó mintákat többfajta normál alkoholban és karbonsavamidban szuszpendáltam a szerkezet megbontásához.

A kialakult kolloidból a réteges szerkezetté történő visszarendezését nátriumsók vizes oldatának adagolásával próbáltam elérni. Vizsgáltam azt is, hogy eközben a hidratáló oldatban található anionok beépülnek-e a mintába, ugyanis a folyamat könnyen kivitelezhető és univerzális ioncsere lehetőségét rejti magában.

A minták jellemzésére a következő módszereket használtam fel: FTIR, XRD, SEM, SEM–EDS, DLS, számítógépes molekulamodellezés

**ÁDÁM PÉTER**

*adam.peter89@gmail.com*

Anyagtudomány

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Sinkó Katalin*

*egy. docens, ELTE TTK*

---

### **Porózus alumínium-oxid szálak szol-gél szintézise**

*Kulcsszavak: kerámiaszál; hőszigetelés; pórus; szol-gél; kompozit*

A munkám során feladatom volt a szol-gél eljárással előállított viszkózus rendszernek a szálalításhoz szükséges ideális viszkozitás kialakítása, a 3D rétegek készítésére alkalmas szálak optimális szálhúzási technikájának kiválasztása. Cél volt még a szálhúzási paraméterek optimalizálása, a szálak porozitásának növelése, és ezáltal a hőszigetelő karakter erősítése, a szálak pórus méreteinek 100 nm alá csökkentése, ennek köszönhetően a hőszigetelő képességek tovább növelése. Távlati célunk egy olyan 3D réteg előállítása, mely a hőkezelés végén egy magas hőmérsékletnek (1000°C) is ellenálló, jó hőszigetelő tulajdonságú, kis sűrűségű, a külső mechanikai behatásoknak is ellenálló anyagot kapjunk. Jelen kutatás részt vesz egy Európai Unió kutatási pályázat céljainak megvalósításában, melyben egy 20 Mach sebességű űrrepülőgép hidrogén-égésű hajtóművének szigetelő anyagának kifejlesztése a feladat.

A kísérletek során a viszkózus, stabil alumínium-oxid (-hidroxid) rendszerből többféle eljárással – elektro-, olvadék és centrifugális oldat spinning technikával) készítettem szálakat. Az elektrospinning nanoszálakat eredményezett, melyek túl törékenynek bizonyultak 3D rétegek előállításához. Az olvadék spinning módszerrel nyert szálak túl vastagok, nehezen lehetett szárítani őket nagyobb mértékű töredezés nélkül, és túl rigidek voltak a szövéshez. A centrifugális oldat spinningen alapuló eljárással sikerült a legjobb minőségű, a célkitűzésekben megfogalmazott tulajdonságú szálakat előállítani. Ráadásul ezek a szálak porózus szerkezetűek, mely tovább fokozza a szigetelőképességüket. A szálak mechanikailag stabilak, nagy fajlagos belső felülettel rendelkeznek, kis szálátmérőjük (2-20  $\mu\text{m}$ ). Könnyen lehet az így kapott szálakból 3D rétegeket képezni. Különböző szárítási kísérletek végeztünk. A leghatékonyabb szárítással a pórusok átlagos átmérőjét sikerült 100 nm alá csökkenteni (70 nm-re). Igen magas hőmérsékletnek is ellenállnak, még ~ 1600 °C-on is stabilak, megőrzik porózus karakterüket. Ez kiugró eredménye a kísérleteinknek, hiszen az irodalomban ismertett leírások szerint az alumínium-oxid rendszerek porózus szerkezetüket elvesztik 1000°C körül  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  kristályképzés miatt. A porózus szerkezet megőrzését valószínűsíthetően az  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  krisztallitok nanomérete eredményezi, a nagyobb méret összetöredelné a kötésrendszert. Kriogélekkel folytatott kísérletek szerint az alumíniumoxid szálkötegek kompozit összetételek mátrix komponenseiként is jól felhasználhatók.

**IGNÁCZ GERGŐ**

*ignaczgerg@gmail.com*

Vegyésmérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Balogh György Tibor*

*c. egyetemi docens, osztályvezető, Richter Gedeon Nyrt.*

*Dr. Kupai József*

*egyetemi adjunktus, BME VBK*

---

### **Szintetikus metalloporfirinek előállítása és alkalmazása gyógyszervegyületek biomimetikus oxidációjában**

*Kulcsszavak: gyógyszeripar; metabolizmus kutatás; áramlásos kémia; szerves preparatív kémia; katalízis*

A szervezetben jelenlévő endogén és exogén anyagok lebontásában kiemelkedő szerepe van a citokróm P-450 elnevezésű izoenzimcsaládnak. Az aktív centrum magjában lévő protoporfirin IX egység szintetikusan előállított metalloporfirin származékokkal modellezhető. Kutatócsoportunk célja egy olyan in vitro rendszer kifejlesztése, amely rövid időn belül, robusztusan képes gyógyszerjelölt molekulák metabolitjainak előállítására.

A modell első fázisa szűrés jellegű, ahol HPLC-MS mérésekkel azonosítjuk az egyes anyagokat, ez egy méretnövelési lépést követően alkalmas lehet a technika áramlásos kémiai rendszerbe való integrálásra. Porfirinek ezen elven való felhasználása egy teljesen új megközelítés, amire még nem találtunk példát a szakirodalomban.



## **Anyagtudomány II.**



**MATEJKA JUDIT**

*matejka.judit@gmail.com*

Biomérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Vértessy G. Beáta*

*tanszékvezető egyetemi tanár, BME VBK*

---

### **Kölcsönható szerkezeti elemek és kölcsönhatási felszín azonosítása egy fehérje-fehérje interakción alapuló molekuláris kapcsoló esetén**

*Kulcsszavak: S. aureus, dUTPáz, Stl, fehérje krisztallográfia, keresztkötés*

Munkám során a *Staphylococcus aureus*-ban található mozgó genetikai elemek terjedését szabályozó molekuláris kapcsolót alkotó fehérjék (Stl illetve egy fág eredetű dUTPáz) kölcsönható szerkezeti elemeit vizsgáltam. Az Stl a DNS-hez kötve gátolja a patogenicitási szigetek kifejeződését (represszió), a dUTPázzal való kölcsönhatás következtében ez a fehérje-DNS komplex felbomlik (derepresszió).

Célom az Stl és a dUTPáz közötti kölcsönható felszínének és ezáltal a patogenicitási szigetek szabályozásában fontos szerepet játszó szerkezeti elemek azonosítása volt. Ennek alapján a jövőben lehetőség nyílhat a mozgó genetikai elemek által hordozott virulencia faktorok különböző *Staphylococcus aureus* törzsek közötti terjedésének megakadályozására. Elsőként olyan dUTPáz fehérjéket vizsgáltam, melyekből egyes szerkezeti motívumok törlésre kerültek: az egyik a fágokra jellemző specifikus inszertet (dLoop), a másik a vad típusú fehérje flexibilis C-terminális karján található V. konzervált motívumot nem tartalmazta (dKar). Korábbi vizsgálatok alapján mindkettő kötődik az Stl-hez, azonban a dLoop mutáns fehérje a dKar fehérjével ellentétben nem mutat a vad típussal megegyező viselkedést. A két fehérje kristályosításával és a kristályok röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálatával szeretnék magyarázatot találni a tapasztalt különbségre. Ennek érdekében többféle körülményben kristályosítottam a fehérjéket és az oldatösszetétel optimalizálását követően a kapott makroszkópikus kristályok szórási képét is vizsgáltam.

Emellett a fehérje-fehérje kölcsönható felszín azonosítása érdekében keresztkötési kísérleteket végeztem, melyek a monomer és dimer állapotban is előforduló Stl fehérje oligomerizációban résztvevő, illetve a dUTPáz enzimmel kölcsönható felszínéről is információt nyújthatnak. Az egyedi fehérjék esetében a keresztkötési reakció során többségében kovalensen kötött dimer Stl, trimer dUTPáz, míg a fehérjék keveréke esetében kovalensen kötött komplex termékek képződtek. Az így kezelt minták tripszinnel történő hasítását követően, tömegspektroszkópiás (MS) mérési eredményekből meghatározható, hogy mely aminosavak vannak egymással térközelségben a fehérjeláncban belül, a dimerben és a komplexben.

**NÉMETH SZILVIA**

*sylvia.nemeth@windowslive.com*

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Kuzmann Ernő*

*egyetemi magántanár, ELTE TTK*

---

## **Alumínium-oxiddal dópolt nátrium- és kalcium-tartalmú szilikátüvegek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával**

*Kulcsszavak: fotokatalízis; vas-mikrokörnyezetek; hematit, metilénkék; olvasztásos technológia*

A környezeti szennyezések eltávolítására a fotokatalízis az egyik legalkalmasabb módszer, aminek felhasználási lehetőségeit széleskörűen vizsgálják gyakorlatban. Az anatóz kristályszerkezetű titán-dioxid jól ismert fotokatalizátor, amely csak UV fény hatására aktiválható. Látható fény aktivált fotokatalizátorok előállíthatók hematitból ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) is, aminek alkalmazását előnyössé teszi, hogy nem mérgező, kémiaiilag stabil, valamint természetes elérhetősége miatt könnyen használható vízbontáshoz és a szennyvízkezeléshez. Korábbi tanulmányok azt mutatták, hogy a látható fény aktivált fotokatalitikus hatás tapasztalható a hematitot tartalmazó nátrium- és kalcium-tartalmú szilikátüvegekben, ahol ez a hatás fokozható, ha alumínium-oxidot adunk a rendszerhez. A fotokatalitikus hatás optimalizálásának alapvető feltétele a nátrium- és kalcium-tartalmú szilikátüvegek fotokatalitikus tulajdonsága és mikroszerkezete közötti összefüggések megismerése. Az üvegszerkezetben előforduló vas mikrokörnyezetek megkülönböztetésére, valamint a hőkezelt üvegekben kiváló vastartalmú fázisok meghatározására a  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer-spektroszkópia egy kiválóan alkalmas módszer.

Ebben a tanulmányban a  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer-spektroszkópia segítségével azt vizsgáltuk, első ízben cseppfolyós nitrogén hőmérsékletén is, hogy hogyan változnak a vas különböző mikrokörnyezetei a rendszerhez adott alumínium-oxid függvényében a hőkezelt  $15\text{Na}_2\text{O} \cdot 15\text{CaO} \cdot 40\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot x\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot (30-x)\text{SiO}_2$  üvegekben, ahol  $x = 0, 11$  és  $20$ .

A dópolatlan minta Mössbauer-spektrumai egy tetraéderes koordinációjú  $\text{Fe}^{\text{III}}$ -at reprezentáló dublettre és egy a hematitnak megfelelő szextetre voltak dekomponálhatók. A dópolás hatására a Mössbauer-spektrumokban egy új spektrumjárulék is fellépett, ami a hőkezelés hatására, a mintákban kiváló kalcium-ferritet reprezentálta.

A hőkezelt nátrium- és kalcium-tartalmú szilikátüvegek szobahőmérsékleten és cseppfolyós nitrogén hőmérsékletén felvett Mössbauer-spektrumainak analízise alapján megfigyeltük, hogy a hematit tartalom fokozatosan nullára csökkent és ezzel egyidejűleg a kalcium-ferrit kiválása történt az alumínium-oxid tartalom növekedésével.

Eredményeinket a fotokatalitikus aktivitásra vonatkozó eredményekkel egybevetve megállapítottuk, hogy nem a hematit tartalom az egyetlen paraméter, ami a fotokatalitikus aktivitást növelheti, hanem a hematit morfológiája, szemcsemérete és fázis környezete is jelentős tényező lehet.

**MEDVECZKY ZSÓFIA**

zsofia.medveczky@gmail.com

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Baji Zsófia*

*Tudományos munkatárs, MTA EK MFA, Mikrotechnológia Osztály*

---

## **Atomi rétegleválással készített galliummal adalékolt cink-oxid rétegek készítése és minősítése**

*Kulcsszavak: atomi rétegleválás; Ga-adalékolás; alacsony leválási hőmérséklet*

Az atomi rétegleválás (ALD) egy kémiai gázfázisú vékonyréteg-leválási módszer, ami egy lehetséges technika különböző vékonyrétegek készítésére és tetszőleges, akár strukturált felületek bevonására. Ezt a módszert számos kedvező tulajdonsága miatt az egyik legígéretesebb vékonyréteg-leválási eljárásnak tartják számon, azonban alkalmazhatóságának korlátot szab relatív nagy időigénye. Az ALD-val történő leválás nagyon pontosan kontrollálható, így könnyen és egyszerűen készíthetők pontosan adalékolt rétegek akár alacsony hőmérsékleten is. A cink-oxid a napelemgyártásban és az optoelektronikában is kedvelt félvezető, melynek tulajdonságai széles körben változathatók adalékolással, amivel nagymértékben javítható a rétegek vezetőképességét. A gallium ígéretes az adalékolás szempontjából, mert a Ga-O (1,92 Å) kovalens kötés hossza nagyon hasonló a Zn-O (1,97 Å) kovalens kötéséhez [1].

A munkám során megvizsgáltam, hogy az eltérő leválási hőmérséklet és a különböző mértékű adalékolás milyen hatásokkal jár a leválított cink-oxid rétegek minőségére vonatkozóan. A dolgozatban bemutatom különböző mértékben galliummal adalékolt cink-oxid rétegek elektromos tulajdonságainak változását a galliummal való adalékolás függvényében. Továbbá a kísérleti munka során megvizsgáltam, hogy a leválási hőmérséklet hogyan befolyásolja az egy ciklus alatt bekövetkező rétegnövekedést, valamint a leválított rétegek felületi morfológiáját. A rétegek vastagságát a lépcsőmarás fotolitográfiával, valamint a spektroszkópiai ellipszometria módszerével mértem meg. A vékonyrétegek felületi érdességének meghatározására atomerő mikroszkópiás méréseket, míg az elektromos tulajdonságok vizsgálatára Hall-mérést végeztem. Az adalékolás sikerességét energia-diszperzív röntgen-fluoreszcens spektroszkópiával ellenőriztem, az adalékolt rétegek kristályszerkezetének vizsgálatát röntgendiffrakciós kísérletekkel végeztem el.

[1] T. Nam, C. W. Lee, H. J. Kim, H. Kim: Growth characteristics and properties of Ga-doped ZnO (GZO) thin films grown by thermal and plasma-enhanced atomic layer deposition, Applied Surface Science, 2014, 295: p. 260-265

**BALOG ÁDÁM**

*balog93@tippnet.rs*

Vegyész MSc

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Szűcs Árpád*

*egyetemi docens, SZTE TTIK*

*Endrődi Balázs*

*egyetemi tanársegéd, SZTE TTIK*

---

### **C<sub>60</sub> és szén nanocső kompozit filmek elektrokémiai vizsgálata**

*Kulcsszavak: módosított felületű elektród; ciklikus voltammetria; Mott-Schottky; impedancia spektroszkópia; fotoelektrokémia*

Az elektrokémiai vizsgálatok a fullerének felfedezése óta fontos szerepet töltek be azok tulajdonságainak megismerésében. A kutatások új területe nyílt meg azzal a felfedezéssel, hogy ezek a molekulák szilárd fázisban, megfelelő vezetők kialakított filmként, elektrokémiaileg aktívak. Ezen vékony rétegekkel történő kísérletek során kiderült, hogy a C<sub>60</sub> filmek porózus belső (intrinsic) félvezetőként viselkednek. A rétegek redukcióját tanulmányozva különböző alkálifém-ionokat tartalmazó vizes oldatokban azt tapasztalták, hogy a redukció ilyen körülmények között irreverzibilis, pH-tól független volt, de a kation minőségétől függően más-más mechanizmus szerint játszódott le. Munkám első részében a csupasz üvegszén elektródra felvitt C<sub>60</sub> filmek vizsgálatával foglalkoztam. A ciklikus voltammogramokon az volt látható, hogy a KCl-os közegű redukció egy csúcsot, míg a NaCl-os kettőt eredményezett. A görbe alatti területek alapján számíthatók voltak a folyamatokhoz szükséges töltések numerikus integrálással, ebből pedig következtetni tudtunk a redukált filmek kémiai összetételére. Ezek alapján a KCl-os közegben történő redukció vezető, míg a NaCl-os porózus n-típusú félvezető réteg kialakulását eredményezte. Ezt a fotoelektrokémiai mérések is alátámasztották, miszerint az aszkorbinsav fotooxidációja csak a semleges C<sub>60</sub>, illetve a NaCl-ban redukált film esetén ment végbe. A potenciál függvényében történő impedanciamérés megmutatta, hogy a redukció előtti szakaszon is vannak változások, valamint a módszer alkalmazásával a simasáv (flat-band) potenciál értékét is meg tudtuk becsülni. Az impedanciaspektrumok illesztéseiből származó fizikai mennyiségek igazolták a voltammogramokból számolt töltések alapján tett feltételezéseket a redukált filmek elektrokémiai tulajdonságairól. A kísérletek második szakasza azzal foglalkozott, hogy a szén nanocső réteggel bevont üvegszén felületnek van-e bármiféle hatása a redukcióra. Azt találtuk, hogy a módosított elektródfelület esetén a folyamat kevésbé negatív potenciálon indult mindkét oldatban, valamint hogy a Na<sup>+</sup>-os voltammogramon két csúcs helyett három jelent meg. Az eredmények alapján próbáltuk magyarázni a redukció mechanizmusát, illetve az impedanciaspektrumokból megadni a folyamat kevésbé negatív potenciálon történő indulásának okát.

**NAGY SEBESTYÉN**

*sebestyennagy92@gmail.com*

Műanyag- és száltechnológiai mérnöki mesterszak

MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Csiszár Emília*

*egyetemi docens, BME VBK*

---

### **Kristályos nanocellulóz előállítása, jellemzése és alkalmazása**

*Kulcsszavak: nanokristály; film; lágyító; gyanta; részecskeméret*

A megújuló cellulóz alapú nyersanyagok hatékony és széleskörű felhasználására a világon mindenütt egyre nagyobb figyelem összpontosul. Az évente keletkező  $1,8 \times 10^{12}$  tonna biomassza hagyományos felhasználási területeinek kutatása mellett az egyik legfontosabb irány a lignocellulózokat alkotó polimerek (cellulóz, hemicellulóz, lignin) kinyerése és ezekből - már viszonylag kis anyagmennyiségek felhasználásával - új tulajdonságú és magas hozzáadott értékű termékek előállítása, amelyeket a gyógyászatban, az analitikában, az elektronikai- és az élelmiszeriparban használhatnak leginkább. Főként a fából és a cellulóz alapú szálanyagokból kiindulva fizikai, kémiai vagy enzimmel segített folyamatok sorozatával juthatunk el a szerkezeti polimerekig. A fás növények legfontosabb polimerje a cellulóz, amely béta-D-glükopiranoz egységekből felépülő lineáris makromolekula. A cellulóz láncok aggregációja fibrillás szerkezeteket hoz létre, amelyek hosszútávú szerveződése kristályos struktúrák képződéséhez vezet. A kristályosság nem teljes, cellulóz forrástól függően kb. 50-90 %. A cellulózzal foglalkozó kutatások egyik ígéretes területe ezeknek a kristályos egységeknek a kinyerését célozza, és az így előállított ún. kristályos nanocellulóz lehetséges felhasználási területeit vizsgálja. Kristályos nanocellulózhoz leginkább a kevésbé rendezett cellulóz részek hidrolitikus bontásával juthatunk. Az így nyert kristályos nanocellulóz néhány nm átmérőjű és körülbelül 100 nm hosszúságú tűkristályokból áll, és egyedülálló módon ötvözi a cellulóz tulajdonságokat a nanoméretű anyagok különleges jellegzetességeivel. Kutatómunkám során összehasonlítottam a fehéritett pamutból, illetve lenből nyert nanocellulóz szuszpenziók és a szuszpenziókból öntött filmek tulajdonságait. Megvizsgáltam, hogyan hat a filmek tulajdonságaira a hozzáadott lágyító típusa és mennyisége. További vizsgálatok során a cellulózt keresztkötő amino-aldehid gyanta hozzáadásával térhálós nanocellulóz filmeket készítettem, majd széleskörűen jellemeztem azokat.

**FARAGÓ ENDRE ZOLTÁN**

*fenzol08@gmail.com*

Vegyésmérnöki

BSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Veszprémi Tamás*

*egyetemi tanár, BME VBK*

*Dr. Höltzl Tibor*

*fejlesztőmérnök, FETI Kft.*

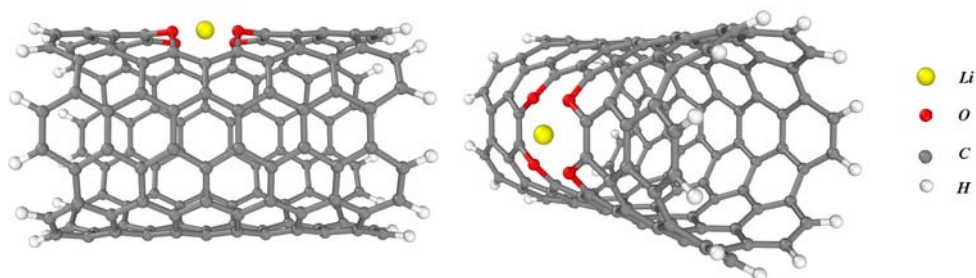
---

### **Oxigénnel dópolt szén-nanocsövek szerkezete és stabilitása**

*Kulcsszavak: nanotechnológia; számítási kémia; nanoszerkezetek; elektródanyag; komplexálás*

A szén-nanocsövek kiváló mechanikai, elektronikus és optikai tulajdonságaik miatt felfedezésük óta a nano-tudományos kutatások kiemelt anyagai közé tartoznak. A nanocsövek szerkezete és tulajdonságai jelentősen befolyásolhatók heteroatomok nanocsövek falába való építésével, úgynevezett dópolással. A dópolt nanocsövek gyakran az eredetitől teljesen eltérő optikai és elektronikai tulajdonságokkal rendelkeznek. Az irodalom számos heteroatom beépítésére tett sikeres kísérletről számol be, azonban mindeddig nem sikerült szisztematikusan oxigénatomokat a falba építeni a nanocsövek szintézise közben, mindössze kész nanocsövek falait sikerült oxidálni.

Kutatómunkám célja képet adni azon stabil, oxigénnel dópolt szerkezetekről, amelyek szintézise és alkalmazása kiemelt stabilitásuk miatt nagyobb jelentőséggel bírhat. Munkám első fázisában sűrűségfukcionál-alapú számítási kémiai módszerekkel megvizsgáltam, mely oxigént tartalmazó szerkezeti elemek és kötéstípusok preferáltak a stabilitás szempontjából. Eredményeim alapján kiemelt stabilitást jelent az oxigénatom C-O-C kötés formájában való beépítése. Ez alapján létrehoztam két olyan szerkezetet, amelyek több ilyen C-O-C típusú kötést tartalmaznak egy gyűrűs vázban. Az így kapott szerkezetek termikus stabilitását empirikus reaktív erőterben végzett számításokkal vizsgáltam. Eredményeim alapján a dópolt nanocsövek magas hőmérsékleten is stabilnak bizonyultak. Megvizsgáltam továbbá a gyűrűs váz komplexálási lehetőségeit is, mely lehetőséget teremthet új ion-szelektív elektródok kifejlesztésére.



A jelen munka hozzájárulhat annak a hosszú folyamatnak az elindításához, amely oxigénnel dópolt nanocsövek szintézisét és alkalmazását célozza, ezzel lehetővé téve a mikroelektronika és katalizátorteknika eszköztárának bővítését.



**SÓS LÁSZLÓ**

*solac75@gmail.com*

Vegyésmérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*László Krisztina*

*egyetemi tanár, BME VBK*

---

### **Redukált grafén-oxid tartalmú hidrogélek**

*Kulcsszavak: grafén; termoreszponzív; poli(N-izopropil-akrilamid) gél; redukció; nanokompozit*

A termoreszponzív poli(N-izopropil-akrilamid) (PNIPA) hidrogél sokoldalú felhasználhatóságának és biokompatibilitásának köszönhetően széleskörű érdeklődésre tart számot. Többek között lágy természete, kis határfelületi feszültsége és nagy áteresztőképessége teszi lehetővé például szabályozott gyógyszerhatóanyag-leadó rendszerként való felhasználását. Kiváló duzzadási tulajdonságait és reverzibilis alakváltozását kihasználva pedig a szenzorikában és aktuátor fejlesztésben alkalmazható. Gyakorlati elterjedésének azonban határt szab, hogy mechanikai tulajdonságai jellemzően gyengék, hidrofób anyagok megkötésére és szállítására kevésbé alkalmas, valamint az egyes paraméterek javítása csak mások rovására érhető el. Ezen korlátozó tényezőkön való felülemelkedést teheti lehetővé kompozit rendszerek kialakítása.

Napjaink legelterjedtebben használt töltőanyagai a különböző szén nanorészecskék. Közülük is kiemelkedik a grafén, mert rendkívüli mechanikai és hővezető tulajdonsága mellett speciális szerkezete miatt kiváló erősítő fázisként szolgálhat, és újabb érzékenységet kölcsönözhet a kompozit gélrendszernek. Hátránya, hogy vízben rosszul diszpergálható, így nem alkalmas homogén hidrogél nanokompozitok készítésére, ellentétben a grafén-oxiddal (GO), amelyből amfifil jellegének köszönhetően könnyen előállítható stabil vizes szuszpenzió. A GO tulajdonságai a grafénhez képest azonban rosszabbak, a tökéletes hatszöges szerkezet hiánya miatt. Számos redukciós lehetőség áll rendelkezésre, melyek során a GO-ból közel grafén-szerkezetű redukált grafén-oxidot (rGO) kapunk. Amellett, hogy ez az eljárás jóval olcsóbb és termelékenyebb lehet a többi grafén előállítási módszernél, az rGO a grafént helyettesítő töltőanyagként lehet jelen hidrogél nanokompozitokban. Munkám során vizsgáltam a nano-töltőanyagként többféle koncentrációban bevitt GO és rGO poli(N-izopropil-akrilamid) hidrogél kompozitok tulajdonságaira gyakorolt hatását. Új módszert dolgoztam ki rGO tartalmú PNIPA gélek előállítására, valamint jellemeztem az alkalmazott nanorészecskéket és kompozitjaikat.

Mintáim karakterizálásához UV-VIS, Raman- és röntgengerjesztéses fotoelektron-spektroszkópiát, termogravimetriát, rugalmassági modulus- és duzzadásfok mérést alkalmaztam.

**ONDOK RÓBERT CSABA**

*ondokrobert@gmail.com*

Vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Janáky Csaba*

*egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

*Kormányos Attila*

*doktorjelölt, SZTE TTIK*

---

### **Szabályozott szerkezetű vezető polimer / SiC nanokompozitok előállítása és fotoelektrokémiai CO<sub>2</sub> redukciós aktivitásának vizsgálata**

*Kulcsszavak: globális felmelegedés; CO<sub>2</sub> redukció, vezető polimer, kompozit*

A CO<sub>2</sub> légköri koncentrációjának csökkentésére az egyik lehetséges megoldás a CO<sub>2</sub> fotoelektrokémiai redukciója, amelynek során a megfelelő fotoaktív anyaggal és napenergia segítségével értékes tüzelő- és vegyipari alapanyagokká alakítjuk át. A CO<sub>2</sub> inertsége miatt fontos olyan fotokatód anyagok fejlesztése, amelyek a megfelelő sajátságokkal rendelkeznek (kis tiltott sáv szélesség, megfelelő sávpozíció, kémiai-, elektrokémiai- és fotostabilitás, nem toxikus és gazdaságosan előállítható), ezáltal hatékonyra és gazdaságossá téve a folyamatot. Ezen kritériumokat jelen pillanatban egyetlen anyag nem tudja teljesíteni, ezért szükség van olyan összetett anyagok, úgynevezett kompozitok előállítására, ahol az alkotók kedvező tulajdonságai együttesen megjelennek az előállított rendszerben. Erre példa a vezető polimerek szerves félvezetőkkel alkotott kompozitjai, amelyek az elmúlt két évtizedben kerültek a figyelem középpontjába sokrétű felhasználhatóságuknak köszönhetően.

Tudományos diákköri dolgozatomban bemutatom, hogyan állítottunk elő elektrokémiai és fotokatalitikus módszerrel polianilin valamint poli(3,4-etiléndioxitiofén) tartalmú, szilícium-karbid alapú félvezető nanokompozitokat. Az elektrokémiai előállítás esetén a polimerizációs töltéssűrűség, a fotokatalitikus módon történő szintézisnél pedig a megvilágítási idő változtatásával szabályoztuk a leváló vezető polimer mennyiségét. A nanokompozitok összetételét infravörös és Raman spektroszkópiai módszerekkel, morfológiáját pásztázó és transzmissziós elektronmikroszkópiás technikákkal, elektrokémiai viselkedését ciklikus voltammetriával, fotoelektrokémiai viselkedését lineáris fotovoltammetriával vizsgáltuk. A CO<sub>2</sub> fotoelektrokémiai redukciója során keletkezett termékeket gázkromatográfiás (GC) technikával detektáltuk. Legfontosabb következtetésünk, hogy a SiC felületét a szerves vezető polimerekkel módosítva a kapott nanokompozitok jobb fotoelektrokémiai viselkedést mutatnak, mint az alkotók külön-külön.

**SZABÓ ANNA**

*anna.szabo992@gmail.com*

Vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Hernádi Klára*

*egyetemi tanár, SZTE TTIK*

*Kecsenovity Egon*

*PhD hallgató, SZTE TTIK*

---

### **Szén nanocső erdők CVD növesztése alumínium szubsztráton**

*Kulcsszavak: szén nanocső erdő; CCVD szintézis; dip-coater; alumínium szubsztrát*

Az elmúlt két évtizedben a szén nanocsővek (CNT) kutatásában fontos eredmények születtek, melyek többek között a szén nanocsővek rendkívül jó elektromos és mechanikai tulajdonságainak köszönhető. A kedvező tulajdonságok maximális kiaknázása érdekében elengedhetetlen a CNT-k szintézisének széleskörű kutatása, melynek egyik fő iránya a szén nanocsővek rendezett, erdőszerű növekedésének kontrollálása.

A munkám során alumínium hordozón, Fe-Co katalizátor alkalmazásával CVD módszerrel szintetizáltunk szén nanocső erdőket, vizsgálva azon paramétereket, melyekkel a szén nanocső erdők magassága befolyásolható. Az CNT szintézisben leggyakrabban alkalmazott 750 °C-tól eltérően, a kísérleteim az alumínium szubsztrát alkalmazása miatt alacsonyabb hőmérsékleten (640°C) történtek.

A kísérleteim során változtattam az előállítás során használt gázok beviteli sebességét, a szintézis reakcióidejét, illetve a réteg építéséhez alkalmazott készülék (dip-coater) paramétereit és a katalizátor „tinta” koncentrációját, annak érdekében, hogy megkapjuk a szén nanocső erdők magasságának minimumát és maximumát. Vizsgáltam továbbá a katalizátor összetétel arányának hatását. A mintákat pásztázó elektronmikroszkóppal vizsgáltuk, illetve a kész minták elektromos vezetését is mértük.

A kísérletek alapján megállapítottuk, hogy az alumínium szubsztráton alacsonyabb hőmérsékleten is lehetséges CVD módszerrel szén nanocső erdők szintézise, valamint az előbbieken felsorolt paraméterekkel lehetőség van a szén nanocső erdők magasságának és minőségének finomhangolására.

A munka az OTKA NN114463 számú támogatás segítségével valósulhatott meg.



## **Anyagtudomány III.**



**FARKAS BALÁZS**

woolfar@gmail.com

Gyógyszervegyész-mérnöki

MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Marosi György*

*egyetemi tanár, BME VBK*

*Dr. Nagy Zsombor Kristóf*

*egyetemi adjunktus, BME VBK*

*Dr. Balogh Attila*

*tudományos segédmunkatárs, BME VBK*

---

### **Cellulózéterek szálképezhetőségének vizsgálata váltóáramú elektrosztatikus szálképzéssel a spironolakton oldódásának gyorsítására**

*Kulcsszavak: formulálás, amorf hatóanyag, méretnövelés, nanoszál, polietilén-oxid*

Az utóbbi évtizedek gyógyszerkutatásainak eredményeként egyre nagyobb számban kerülnek felfedezésre vízben gyengén oldódó hatóanyagok, mely nem kielégítő terápiás hatást eredményezhet a szervezetben. Szilárd diszperziókká formulálva ezeket a hatóanyagokat a kioldódás jelentősen javítható a hidrofíli polimer hordozó és az amorf hatóanyag nagyobb oldhatóságának köszönhetően. A változatos szilárd diszperziós előállítási módszerek között ígéretes lehetőség az oldószeres elektrosztatikus szálképző technológiák alkalmazása, mely során egy polimer és a hatóanyag oldatából nagyfeszültségű elektrosztatikus erőter hatására szálas szövetek képződik, így az amorf forma mellett a nagy fajlagos felület is az oldódást segíti.

Cseh kutatók nemrégiben rámutattak, hogy ha az elterjedten alkalmazott egyenáramú nagyfeszültségű áramforrást váltóáramra cseréljük, akkor az egyszerűbb szálgyűjtés mellett az elérhető termelékenység is többszöröződik (Pokorny et al. 2014). Ennek ellenére a módszer felhasználását eddig jóval kevesebb közleményben vizsgálták.

Az előzők alapján a kutatómunkám célja szálas amorf szilárd diszperziók előállítása volt váltóáramú oldószeres elektrosztatikus szálképzéssel a rossz vízoldhatóságú spironolakton modellhatóanyag kioldódásának gyorsítására, melyhez cellulóz éter alapú polimereket használtam fel. A cellulózéterek nagy jelentőséggel bírnak a gyógyszer technológia területén, mivel a forgalomban levő amorf szilárd diszperziós gyógyszerkészítmények kétharmada ezeken a polimereken alapul. Váltóáramú oldószeres elektrosztatikus szálképzéssel azonban ez idáig nem dolgoztak fel ilyen típusú anyagokat.

Az alkalmazott segédanyagok helyes megválasztásának köszönhetően a többszörös termelékenység mellett is kiváló minőségű szálas terméket lehetett előállítani a cellulózéterek felhasználásával. A kristályossági vizsgálatok (DSC, XRD) kimutatták, hogy a hatóanyag amorf formában volt jelen a szálakban. A kioldódás vizsgálatok során a szálképzett amorf szilárd diszperziók figyelemre méltó javulást mutattak a kristályos hatóanyag és a forgalmazott spironolakton tabletta hatóanyag-leadásához képest. Az eredmények igazolják, hogy a váltóáramú oldószeres elektrosztatikus szálképzés alkalmas módszer lehet a nagy fajlagos felületű szilárd diszperziók gyógyszeripari előállítására.

**NÉMETH ZSÓFIA**

*nemeth.zsolia@yahoo.com*

Kémia

BSc, 4. félév

Eszterházy Károly Főiskola

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Dr. Jedlovsky-Hajdú Angéla*  
*tudományos munkatárs, SE ETK*

*Molnár Kristóf*

*Semmelweis Egyetem, Biológiai-Sugárbiológiai Intézet Nanokémiai Kutatócsoport*

---

### **Elektrosztatikus szálképzéssel előállított poliaminosav alapú hálók vizsgálata**

*Kulcsszavak: polimer; szálhúzás; szövet; gélszál; pH-válasz*

A nanotudományok fénykorukat élik, számos kiaknázatlan lehetőséggel kecsegtetnek. Az orvosi biológiai fejlesztések pedig kiemelten fontosak, hiszen jobb a szervezet számára, ha a mesterséges anyagok helyett természetes alapúakat használunk a gyógykezelések során. Így elektrosztatikus szálképzéssel előállított poliaminosav alapú hálók kutatása is felívelőben van. Lehetőséget látnak az alkalmazásra mind a szövetmérnökség, mind a gyógyszerhatóanyag bejuttatás területén.

A poliaszparaginsav (PASP) egy biokompatibilis és biodegradálható polimer. Poliszukcinimidből (PSI) alakítható át enyhe lúgos hidrolízissel. Azonban sok más lebomló polimerhez hasonlóan a PASP vízzel oldható, amely tulajdonság hosszú távú szerkezetbeli használatát korlátozza. Egy lehetséges megoldás keresztkötések kialakítása a polimer láncok között, ami által hidrogélekhez jutunk, melyek hasonlítanak szervezetünk lágy szöveteire nagy folyadéktartalmuk és rugalmasságuk miatt. A hasonlóság fokozható, ha nanoméretű szálakból építjük fel a szövetet. Elektromos szálképzés során nagy feszültség hatására polimer oldatból nanoszálak szerkezetű hálót kaphatunk. Ezek a hálók nagy felülettel és porozitással rendelkeznek, és a szálakban keresztkötéseket kialakítva gélszál halmazt kaphatunk, mely folyadék felvételére képes anélkül, hogy feloldódna. A módosult kémiai szerkezet mechanikai és kémiai stabilitást biztosít a hálóknak.

Munkám során új eljárást dolgoztam ki PASP alapú gélszálakból felépülő szövetek kialakítására. A vizsgálatokhoz PSI alapú hálókat keresztkötő oldatába mártottam, majd enyhén lúgos oldatban hidrolizáltam. Vizsgáltam ezek pH változásra adott reakcióit.

Mikroszkópos vizsgálatok során megbizonyosodtam arról, hogy elektrosztatikus szálhúzással nanoszálak létrehozása sikeres volt. Keresztkötéseket alakítottam ki a PSI-láncokon, ugyanis az elhidrolizált molekulák vizes közegben nem oldódtak fel. A pH-válaszra vonatkozó kísérleteim azt mutatták, hogy a gél szálakból felépülő szövetek makroszkopikusan ugyanúgy savas közegben zsugorodnak, míg lúgos közegben megduzzadnak, mint a hasonló összetételű tömb gélek valamint a legnagyobb méretüket pH 7 körül érik el.

Dolgozatomban új eredményeket mutatok be, melyek ez idáig nem kerültek publikálásra a szakirodalomban. Ezek alapjául szolgálhatnak új kutatásoknak gélszálakból felépülő szövetek előállításának, viselkedésének vagy gyógyszer hatóanyag leadó rendszerek tervezésének tekintetében.



**BÓDI DORINA**

*dorina.bodi@gmail.com*

Vegyésmérnöki

BSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Hóltzl Tibor*

*fejlesztőmérnök, FETI Kft.*

*Dr. Veszprémi Tamás*

*egyetemi tanár, BME VBK*

---

### **Foszforén nanopelyhek: új, flexibilis anyagok hangolható mechanikai és optikai tulajdonsággal**

*Kulcsszavak: kétdimenziós anyag; számításhes kémia; nanotechnológia*

A kétdimenziós anyagok olyan kristályos anyagok, melyeket egy vagy néhány réteg atom épít fel. Az első előállított kétdimenziós anyag a grafén volt, melyet a grafít egyetlen rétegét leválasztva kaphatunk meg. A kétdimenziós anyagok segítségével olyan új termékek állíthatók elő, melyek az eddigi technológiákkal és anyagokkal nehezen, vagy egyáltalán nem valósíthatók meg.

Az egyik legígéretesebb új kétdimenziós anyag a foszforén. A ragasztószalagos eljárással grafítból kapott grafén mintájára előállítottak már feketefoszforból foszforént. A foszforén félvezető és közvetlen tiltott sávval rendelkezik, melynek szélessége kb. megegyezik a szilíciuméval. Anizotróp szerkezete különleges mechanikai, elektronikai, mágneses, optikai és termikus tulajdonságok megjelenéséhez vezetnek.

Munkám célja a foszforén kétdimenziós rácsából származtatható nanorészecskék új tulajdonságainak feltárása és annak megértése, hogy ezek a tulajdonságok miképp befolyásolhatók a részecske méretének és alakjának változtatásával. A foszforén nanorészecskék tulajdonságait vizsgáltam számításhes kémiai módszerek segítségével. A vizsgálatok során különböző számítási módszereket teszteltem és kiválasztottam a vizsgált tulajdonságok leírására legalkalmasabbat.

Stabilitását vizsgálva elmondható, hogy a foszforén nanopelyhek energiája minden esetben kisebb a fehérfoszforénál, azaz energetikai szempontból viszonylag stabilis szerkezetekről van szó. Különböző hőmérsékleten végzett szabadentalpia számítások azt mutatták, hogy foszfénból való gázfázisú előállítás során a fehérfoszfor képződése várható a nagyobb entrópiánövekedés miatt, így a nanopelyhek várhatóan oldatban vagy felületen állíthatók elő.

Dinamikai számításokból azt a következtetést vonhatjuk le, hogy bár a foszforén nanopelyhek flexibilisek, de laboratóriumi körülmények között síkszerkezetűnek tekinthető a részecske, és magasabb hőmérsékleten sem tekeredik fel, csak deformálódik a nanopehely.

Vizsgáltam a foszforén nanorészecskék optikai tulajdonságait és azt tapasztaltam, hogy a gerjesztési energia a legkisebb nanopelyhek estében a legnagyobb, és a méret növelésével csökken. Ilyen módon nemcsak a gerjesztési energiának a részecske méretével való beállítására van lehetőség, hanem többféle méretű nanopehely együttes alkalmazásával a fény spektrumának széles tartományát elnyelő rendszer készíthető. Így a foszforén nanopelyhek napelemek aktív anyagai lehetnek, illetve új, hatékony fotokémiai katalizátorok kifejlesztéséhez járulhatnak hozzá

**MUSZA ALEXANDRA**

*muszandra@gmail.com*

Anyagtudomány

MSc, 11. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Sinkó Katalin*

*egyetemi docens, ELTE TTK*

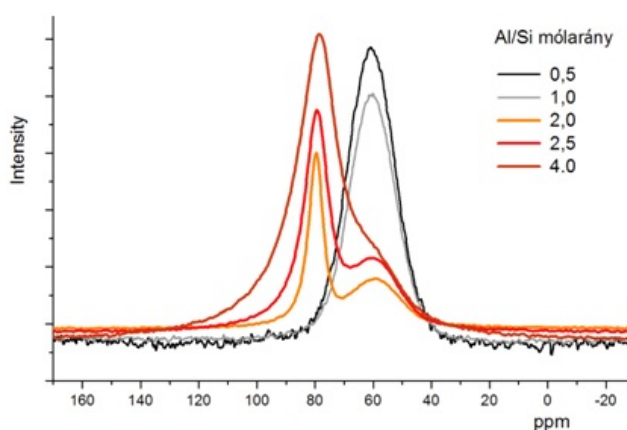
## **Geopolimerek oldatfázisú szintézise és szerkezetvizsgálata**

*Kulcsszavak: környezetbarát; geopolimer; szol-gél; nanokompozit; alumínium-szilikát*

Az építőipar igényeinek és a környezetszennyező hulladékok elszaporodásának problémája vetette fel új, környezetbarát anyagok kidolgozását, így születtek meg a geopolimerek. A geopolimerek iránti érdeklődést az indokolja, hogy olcsón, kedvező körülmények között, változatos módon előállíthatóak. Számos előnyös tulajdonsággal rendelkeznek, úgymint a tűz- és hőállóság, kémiai ellenállóképesség, biokompatibilitás, keménység.

A geopolimerek atyjának Joseph Davidovitsot nevezzük, aki 1970-ben adta ezt a nevet az alacsony hőmérsékleten és légköri nyomáson képződő háromdimenziós alumínium-szilikátoknak. Összegképletük:  $M_n [-(SiO_2)_z-AlO_2]_n \cdot w H_2O$ . Az előállítás folyamatát és az ebből adódó tulajdonságokat az alumínium- és a szilícium-perkurzorok egymáshoz viszonyított aránya határozza meg.

A kísérletek során az alumínium-szilikát rendszereket szol-gél módszerrel állítottuk elő különböző Al/Si arány mellett (0,5/1,0; 1,0/1,0; 1,75/1,0; 2,5/1,0; 4,0/1,0 Al/Si aránnyal). Nátrium-acetátot és vízűveget elegyítettünk lúgos vizes közegben (pH $\approx$ 14) és szobahőmérsékleten. A kapott mintákat 100 és 1000 °C között hőkezeltük és vizsgáltuk. A kötések jellemzésére IR és NMR vizsgálatokat végeztünk, a hőkezelés során lejátszódó átalakulásokat pedig termoanalízissel követtük, a makroszkópikus anyagi tulajdonságaikat pedig keménység méréssel jellemeztük.



Ábra:  $^{27}Al$  MAS NMR vizsgálatok az Al/Si molarány függvényében.

Az  $>1,0$  Al/Si molarányú minták extra keménységgel rendelkeznek. Ennek okát a szerkezetvizsgálatok a geopolimerek nanokompozit szerkezetével igazolják (Al MAS NMR ábra). A szerkezet alapja, a kompozit mátrixa egy amorf alumínium-szilikát térháló, melybe alapvetően Al-tartalmú, nanoméretű, kristályos részecskék ágyazódnak. Az extra keménységet a nanoméretű szemcsékből álló szekunder fázis okozza.

## BÉRCZES VIRÁG

berczes.virag@gmail.com

Vegyésmérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Berke Barbara*

*doktoráns, BME VBK*

*László Krisztina*

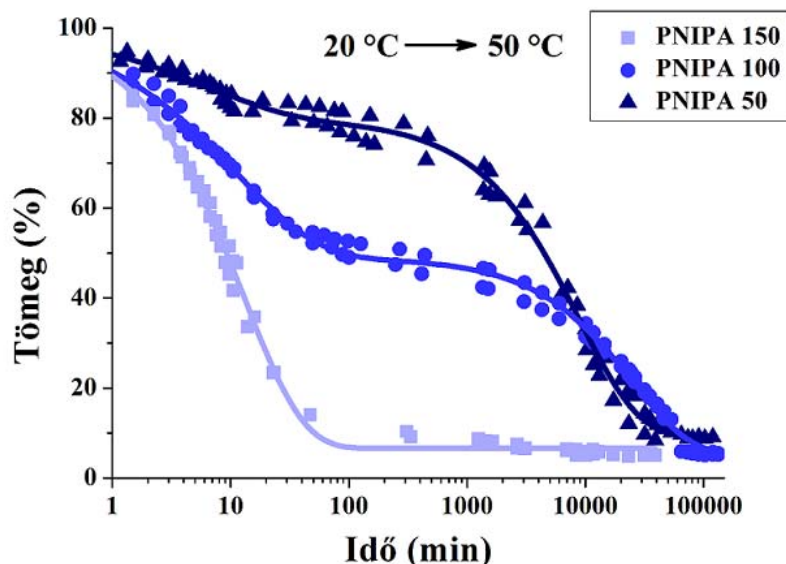
*egyetemi tanár, BME VBK*

---

### Hatóanyag-leadást befolyásoló kölcsönhatások lágy gélekben

*Kulcsszavak: poli(N-izopropil-akrilamid) gél; rezponzív polimer; szabályozott hatóanyag-leadás; fenol; ibuprofen*

Napjaink egyik leginkább kutatott területei közé tartozik - sokrétű felhasználhatóságuknak köszönhetően - a környezeti hatásokra gyors, reverzibilis választ adó úgynevezett rezponzív anyagok viselkedésének tanulmányozása. Ezek az anyagok alkalmasak lehetnek pl. hatóanyag-leadásra és a környezetből jövő ingerek érzékelésére képes mikro- és nanoeszközök készítésére egyaránt. A poli(N-izopropil-akrilamid) (PNIPA) termoreszponzív hidrogél előnyösen használható ezekre a célokra, mert fázisátalakulási hőmérséklete az emberi test hőmérsékletének közelében van, ill. ez a hőmérséklet a duzzasztószer cél szerinti megválasztásával ugyancsak hangolható.



A hőmérséklet-indukált zsugorodás kinetikája az eltérő térhálósűrűségű gélekben

Munkám során arra kerestem választ, hogy a PNIPA gél keresztkötő-sűrűségének változtatása alkalmas-e a hatóanyag leadás befolyásolására. Háromféle térháló sűrűségű gélen a fenol és az ibuprofen volt a két próbamolekula. Vizsgáltam, hogy a térháló sűrűség hatása hogyan befolyásolja a gél és a hatóanyag közti kölcsönhatásokat és ezáltal a hatóanyag gélbeni kristályosodási tulajdonságait.

**BAKOS LÁSZLÓ PÉTER**

*laszlobakos@hotmail.com*

Vegyésszmérnök

MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Szilágyi Imre Miklós*

*tudományos munkatárs, BME VBK*

---

### **Mag/héj és üreges szén nanogömb/fém-oxid nanokompozitok**

*Kulcsszavak: ALD; szén nanoszerkezet; titán-dioxid; cink-oxid; fotokatalízis*

A napenergia fotokatalízishez történő felhasználása egy környezetbarát módszer környezeti problémák kezelésére. A  $\text{TiO}_2$  és a  $\text{ZnO}$  kedvező fotokatalizátorok, mivel kémiaiilag stabilak, nem-toxikusak és nagy a reakciókészségük. A foto-gerjesztett töltéshordozók a gyors elektron-lyuk rekombináció miatt rövid életűek, így célszerű egy ko-katalizátor alkalmazása a jobb töltés-szétválás és a lassabb rekombináció érdekében. A szén-alapú nanoanyagok nagyon elterjedtek köszönhetően nagy felületüknek, jó hő- és elektromos vezetőképességüknek, mechanikai és kémiai stabilitásuknak, így ideális anyagok ko-katalizátornak C/fém-oxid kompozitokban. A fém-oxidokat sokféle módszerrel lehet felvinni a különféle szénhordozók felületére, például atomi rétegleválasztással (ALD) is. Az ALD lehetővé teszi nanoszerkezetek felületének kényelmes és homogén bevonását, a réteg vastagsága nanométeres pontossággal szabályozható. A szén nanogömbök emellett alkalmasak templátként üreges fém-oxid gömbök előállításához, melyek speciális optikai, fotoelektrokémiai és katalitikus tulajdonságokkal rendelkeznek.

TDK munkám célja félvezető-oxid nanorétegek növesztése volt szén nanogömbökre, majd a szén templát kiégetésével üreges oxid nanogömbök előállítása. Az előállított mintákat TG-DTA/MS, FTIR, Raman, XRD, SEM-EDX, TEM-SAED technikákkal vizsgáltam. Fotokatalitikus aktivitásuk feltérképezéshez metilnarancs festék oldatában figyeltem UV fényben a festék bomlását UV-VIS spektroszkópiával.

Szén nanogömbökre  $\text{TiO}_2$ -ot és  $\text{ZnO}$ -ot növesztettem ALD-vel. A TG/DTA-MS vizsgálat alapján a szén gömbök bomlása héliumban  $300\text{ }^\circ\text{C}$ -on kezdődik, így biztonságosan tudtam végezni az ALD-t a szén templát károsítása nélkül. A levegőben történő termoanalitikai vizsgálatból kiderült, hogy  $600\text{ }^\circ\text{C}$ -ig kiég a szén mag, így hevítéssel elő tudtam állítani a kompozitokból az üreges oxid gömböket. Az FTIR és Raman spektroszkópiái, valamint az EDX mérések alapján sikeres volt az ALD filmnövesztés a szén gömbökön és a szén eltávolítása a kiégetés során. Az XRD és a SAED mérések kimutatták, hogy  $\text{ZnO}$  már az ALD leválasztás után, míg a  $\text{TiO}_2$  csak hevítés után lett kristályos. A SEM és a TEM mérések szerint a minták megtartották gömb alakjukat leválasztás és kiégetés után is, illetve a kiégetés után üreges szerkezetűek lettek. A fotokatalízis vizsgálatból kiderült, hogy a tiszta szén nanogömb és a szén nanogömb/félvezető-oxid kompozitoknál esetén nincs jelentős fotokatalitikus hatás, ellenben az üreges oxid gömböknél van.

**REKOB ÁDÁM**

*prekob.a@gmail.com*

Anyagmérnök

BSc, 5. félév

Miskolci Egyetem

Műszaki Anyagtudományi Kar

*Témavezető:*

*Dr. Vanyorek László*

*adjunktus, ME MAK*

---

### **Mag-héj szerkezetű szén nanocső alapú katalizátorok fejlesztése**

*Kulcsszavak: katalízis, szén nanocső, hidrogénezés, palládium*

TDK munkám során maghéj szerkezetű katalizátorhordozót állítottam elő, amely megfelelő hő és elektromos vezetéssel rendelkezik a felületen lévő nanocsöveknek köszönhetően. A nanocső alapú katalizátorhordozók tulajdonságai a felhasználási igényeknek megfelelően jól alakíthatók és ez a tulajdonságuk is ígéretes katalizátorhordozóvá teszi a szén nanocsöveket. Ezek felületére palládium nanorészecskéket hoztam létre és teszteltem katalitikus hidrogénezésben. A gázfázisú hidrogénezés során a butilén konverziója 50°C-on 95%, 100°C-on 97% lett. A katalizátort folyadékfázisú hidrogénezésben is teszteltem, ebben az esetben 70°C-on az oktadecén 97%-a alakult át, még 90°C-on teljes volt a konverzió. Az eredmények nagy katalitikus aktivitást mutattak. A palládiumtartalmú BCNT-zeolit esetében a palládium tartalom a zeolit tömegére vonatkoztatva 0,03 m/m%, a zeolit felületén található szén nanocsövekre vonatkoztatva pedig 1,19 m/m%. Viszonylag kis mennyiségű nemesfém só felhasználásával magas katalitikus aktivitással rendelkező egyszerűen kezelhető katalizátorok állíthatók elő.

Célul tűztük ki, hogy a jövőbeli tesztekben megfigyeljük a katalizátorok élettartamának hosszát (az eddig elvégzett négy órás teszten jól teljesített). Ezen kívül foglalkozni szeretnénk a katalizátor szelektivitásának vizsgálatával. Ugyancsak tesztelnénk más reakciókban is, mint az anilin szintézise, vagy éppen a toluilén-diamin előállítása során alkalmazott redukciós lépésekben.

**SAMU ANGELIKA ANITA**

*samuangelika@gmail.com*

Vegyész

MSc, 2. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Janáky Csaba*

*egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

*Hursán Dorottya*

*PhD hallgató, SZTE TTIK*

---

### **Pórusos szén nanostruktúrák előállítása és alkalmazása elektrokémiai CO<sub>2</sub> redukcióban**

*Kulcsszavak: Szén-dioxid redukció; hierarchikusan pórusos szén struktúra; elektrokatalizátor; vezető polimer; tüzelőanyag*

Az emberi tevékenység fokozott hozzájárulása miatt a légkör CO<sub>2</sub> koncentrációja elérte a 400 ppm-et [1]. A jelenlegi technológiák, melyek a CO<sub>2</sub> csökkentésére és fizikai megkötésére fókuszálnak, azonban nem elég hatékonyak. Előtérbe kerültek az elektrokémiai eljárások a CO<sub>2</sub> átalakítása érdekében, melyek előnye azon túl, hogy termékként tüzelőanyag, illetve egyéb hasznosítható alapanyag nyerhető, az energiaigényük biztosítható megújuló energiaforrások, mint például a napenergia, segítségével. A jelenleg alkalmazott legnagyobb hatékonysággal működő katalizátorok főként drága fémeket vagy nemesfémeket tartalmaznak, amelyeket szeretnénk kiváltani az olcsóbban előállítható, ugyanakkor hasonló aktivitással rendelkező katalizátorokkal. Erre ígéretes lehetőséget biztosíthatnak különböző pórusos szén-struktúrák alkalmazása.

A Tudományos Diákköri munkám során célul tűztük ki különböző nagyfelületű, pórusos szén-struktúrák előállítását vezető polimerekből kiindulva, és ezeknek az anyagoknak az alkalmazását a CO<sub>2</sub> elektrokémiai redukciójában. A vizsgált anyagokat egy, a szakirodalomban leírt [2] kémiai szintézis alapján állítottuk elő, melynek során nitrogén heteroatomokat tartalmazó szén-struktúrákat kaptunk. A különböző prekursorokból előállított pórusos szeneket pásztázó- és transzmissziós elektronmikroszkóppal, Raman-spektroszkópiával és N<sub>2</sub> adszorpciós eljárás alkalmazásával jellemeztük. Ezen módszerek segítségével információt szereztünk a morfológiáról, a pórusszerkezetről, a fajlagos felületről, illetve a pórusméret eloszlásról.

Az előállított anyagok elektrokémiai viselkedését voltammetriás módszerekkel tanulmányoztuk. A CO<sub>2</sub> redukcióban mutatott aktivitását lineáris voltammetriával vizsgáltuk. Ezt követően hosszú idejű potenciosztatikus mérések során vizsgáltuk az elektródok stabilitását redukciós folyamatokban, illetve analizáltuk a keletkező termékeket. Termékként CO képződését sikerült kimutatnunk.

[1] Monastersky, R. *Nature*, 497 (7447), 13-14 (2013)

[2] To, J.W.F., Chen, Z., Yao, H., He, J., Kim, K., Chou, H.-H., Pan, L., Wilcox, J., Cui, Y., Bao, Z., *ACS Cent. Sci.*, 1(2), 68-76 (2015)

**BARCZIKAI DÓRA**

*barczikai.dora@gmail.com*

Biomérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Szilágyi András*

*egyetemi docens, BME VBK*

---

### **Reverzibilisen duzzadó redox érzékeny poli(aszparaginsav) hidrogélek**

*Kulcsszavak: poliaminosav; polimer hidrogél; redox-reszponzív; hatóanyag-leadás; szabályozott duzzadás*

A kémiai poliaminosav hidrogélek váza olyan háromdimenziós hidrofil polimer térháló, amely vizes közegben duzzad, de nem oldódik fel. Nagy vízmegkötő képességük, a szövetekhez hasonló mechanikai tulajdonságaik, viszkoelasztikus jellegük, várható biokompatibilitásuk és biológiai lebonthatóságuk számos gyógyászati alkalmazást tesz lehetővé, többek között a célzott rákterápia és a mesterséges szövetépítés területén. A polimer hidrogélek fontos csoportját képezik a rezponzív gélek, melyek egy előre meghatározott válaszreakcióval – pl. térfogatváltozás – reagálnak bizonyos környezeti paraméterek, pl. a pH, a hőmérséklet vagy a redox potenciál megváltozására. A tiol-diszulfid átalakulásnak kiemelt biológiai jelentősége van, mivel a szervezetben előforduló redox folyamatok kulcsmediátora a glutation egy tiolcsoportot tartalmazó tripeptid. A glutation redukált formájának koncentrációja lényegesen eltérő a sejten belüli és sejten kívüli terekben, és megemelkedett koncentrációban van jelen rákos sejtekben. Az ebből következő koncentráció gradiens adja az alapját számos redox-reszponzív, elsősorban tumoros megbetegedések kezelésére szolgáló, hatóanyag-hordozó mátrix fejlesztésének.

Munkám célja olyan hidrogél előállítása volt, mely redox hatásra reverzibilis térfogatváltozással reagál, így szabályozott hatóanyag-leadó rendszer alapja lehet. A hidrogélek kiindulási anyagának a poliaszparaginsavat választottam.

A hidrogélek előállításához tiolcsoportokkal módosított poliaszparaginsavat kémiaiag térhálósítottam vizes közegben egy redukcióra nem érzékeny keresztkötő molekulával. A permanens keresztkötéseknek köszönhetően az előállított hidrogélek redukáló közegben duzzadtak, de nem oldódtak fel. Meghatároztam az előállított gélek duzzadásfokát és rugalmassági modulusát különböző redox potenciálú környezetben, illetve ezen tulajdonságok változásának reverzibilitását az összetétel függvényében.





# **Biokémia, biotechnológia I.**



**GAL CRISTIAN ANDREI**

*k.gal@hotmail.com*

Kémia

BSc, 6. félév

Babeş-Bolyai Tudományegyetem

*Témavezető:*

*Paizs Csaba*

*egyetemi tanár, RO BBTE*

---

**A CaL-B lipáz nanorészecskére való rögzítése, valamint alkalmazása, optikailag tiszta aril, heteroaril szekunder alkoholok előállítására**

*Kulcsszavak: biokatalízis; enzimátikus rezolválás; szekunder alkoholok*

Kutatómunkánk célja királis (hetero)aril vázakra épülő szekunder alkoholok enantioszelektív szintézise nanohordozókra immobilizált CaL-B lipáz segítségével. Az enzim mágneses nanorészecskére, valamint szénnanocsőre való kovalens rögzítése glicerinnal diglicidil étert használva kapcsolószerként kiváló hozammal ment végbe. Az immobilizált enzimek magas enantioszelektivitást és aktivitást mutatnak számos racém (hetero)aril alkoholok enantioszelektív acilezésében, bizonyítva alkalmazhatóságukat a biokatalízis területén.

**SUPALA ESZTER**

*supalaeszter@gmail.com*

Biomérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Kellermayer Miklós*

*egyetemi tanár, SE ÁOK*

---

### **A mezo-tetrakis(4-N-metilpiridil)porfirin hatása a DNS-molekula szerkezeti és nanomechanikai tulajdonságaira**

*Kulcsszavak: DNS; mezo-tetrakis(4-N-metilpiridil)porfirin; atomi erő mikroszkóp; kontúrhossz; perzisztenciahossz*

A porfirinek a fotodinamikus terápiák során széles körben alkalmazott fényérzékenyítő vegyületek. Az eljárás folyamán a szert a szervezetbe juttatják, majd nagy hullámhosszúságú, kis energiájú látható fénnel sugározzák be a kezelni kívánt területet. A molekula gerjesztett állapotba kerül, amelyből úgy jut vissza alapállapotba, hogy energiáját átadja a jelen lévő oxigénnek vagy annak származékainak. A folyamat eredményeként szabadgyökök és szinglet oxigén keletkezik, amelyek oxidálják a sejtekben található fehérjéket, nukleinsavakat és lipideket, és ezzel apoptotikus vagy nekrotikus folyamatokat válthatnak ki. Mivel a felfokozott anyagcsere miatt a fényérzékenyítő vegyületek jellemzően a daganatos sejtekben és gyulladásos szövetekben szaporodnak fel, továbbá az eljárás lokálisan is alkalmazható, a terápia alkalmas tumoros megbetegedések és bakteriális fertőzések kezelésére, valamint vírusok inaktiválására.

Az általam modell porfirin molekulaként alkalmazott mezo-tetrakis(4-N-metilpiridil)porfirin (TmPyP) a DNS-molekulába interkalálva és a kisértékekbe kötve megváltoztatja annak fizikai és kémiai tulajdonságait. Így vélhetően egy másik, eddig pontosan nem ismert mechanizmuson keresztül is hat. E hatás részleteinek felderítése közelebb vihet minket a vegyület hatásmechanizmusának megértéséhez.

Munkám célja az volt, hogy megállapítsam, hogy a TmPyP a DNS-hez kötődve megváltoztatja-e annak globális szerkezeti és nanomechanikai tulajdonságait. A kísérletek során ötféle hosszúságú DNS-szekvenciát vizsgáltam, amelyekből négyet úgy állítottam elő, hogy a leghosszabb szálát emésztettem restriktációs enzimekkel. Ezekről a kontroll mintákról, illetve az ezekhez telítési koncentrációban hozzáadott TmPyP-t tartalmazó komplexekről készítettem nagy felbontású képeket atomi erő mikroszkóppal. A felvételekről minden mérési ponton 1000-1000 molekulát választottam ki, és lemértem a kontúrhosszukat, illetve a vég-vég távolságukat. Ezekből az adatokból függvény-illesztéssel megkaptam a kontroll és a kezelt DNS-szálak hajlítási merevségét jellemző perzisztenciahosszakokat. A kezelés hatására a paraméterekben bekövetkező változást statisztikai próba segítségével vizsgáltam.

**BEDŐ ZSÓFIA**  
*bezsofi@gmail.com*  
Biomérnöki  
BSc, 11. félév  
  
Pannon Egyetem  
Mérnöki Kar

*Témavezető:  
Dr. Gubicza László  
egyetemi tanár, PE MK*

---

### **Enzimkatalitikus biokenőanyag előállítás mikrohullámú hőközléssel ionos folyadékban**

*Kulcsszavak: biokenőanyag; mikrohullám; ionos folyadék; enzim; szinergencia*

Munkám során biokenőanyag (izoamil-oleát) előállítását tanulmányoztam enzim katalizált észterezési reakcióval természetes izoamil-alkoholból és olajsavból, nem konvencionális közegekben (szerves oldószer, ionos folyadék).

Vizsgáltam ezen rendszerek esetén a konvencionális és a mikrohullámú hőközlés hatását a reakciósebességre, a konverzióra és az enzim aktivitására. Munkám kiemelt célja az volt, hogy ezek eredményeit összehasonlítsam szerves oldószeres közegben és ionos folyadékban, illetve -konvencionális-, és mikrohullámú hőközlés esetén.

A kísérleteimet IKA KS4000 típusú és New Burnswick G24 típusú rázóinkubátorokban és CEM Discover, Batch Mate típusú mikrohullámú reaktor segítségével végeztem. Szerves oldószerként n-hexánt és toluolt alkalmaztam, míg ionos folyadékként [bmim]PF<sub>6</sub>-ot. Az észterezési reakció során *Candida antarctica* lipáz B rögzített enzimet használtam katalizátorként. A konverzió mértékét gázkromatográfiás és titrimetriás vizsgálatok segítségével határoztam meg a kezdeti olajsav tartalom ismeretében.

Méréseim alapján megállapítható, hogy az enzim aktivitása és működési stabilitása jobbnak adódik ionos folyadék közegben és mikrohullámú hőközlést alkalmazva, mint konvencionális hőközlés és szerves oldószer használatakor. Mikrohullámú hőközlés használata esetén továbbá nagyobb volt a reakciósebesség, mint konvencionális hőközléskor. E jelenségek magyarázatául szolgálhat, hogy az ionos folyadék, mint közeg, kedvezőbb az enzim számára és az így tovább képes megőrizni a stabilitását. Meglepő módon azt is tapasztaltam, hogy az ionos folyadék és a mikrohullámú hőközlés együttes alkalmazása szinergens hatást vált ki az enzimaktivitásra nézve. Tehát a két hatás együttes alkalmazásuk esetén felerősítik egymást. Az enzimaktivitás fokozódásának egyik lehetséges magyarázata, hogy az ionos folyadéknak kiváló a mikrohullám elnyelő képessége és kompatibilis rendszert alakít ki mind a szubsztráttal mind a termékkel, és ezáltal megakadályozza az enzim dezaktiválódását.

**ROZBACH MARGARÉTA**

*rozbachgreti@gmail.com*

Biomérnök

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Barta Zsolt*

*egyetemi adjunktus, BME VBK*

---

### **Fermentációs úton történő xilit előállítás búzaszalmából**

*Kulcsszavak: biofinomítás; lignocellulóz; édesítőszer; hidrolízis; biokonverzió*

Mai világunkban egyre fontosabb szerephez jutnak a környezetbarát vagy más néven „zöld” technológiáknak, melyek lényegesen kevesebb terhet rónak környezetünkre, valamint törekednek a megújuló nyersanyagforrások kihasználására. Így jelent meg a XXI. században a kőolaj finomítás mintájára az úgynevezett biofinomítás is. A biofinomító olyan integrált egységet jelent, amely képes biológiai alapanyagokból hasznos termékeket előállítani. A biofinomítás nyersanyaga lehet a lignocellulóz alapú biomassa. A lignocellulóz a Földön bőséges mennyiségben előforduló, igen olcsó nyersanyag, melynek felhasználásával, értéknövelt termékeket, különböző vegyipari és élelmiszeri ipari alapanyagokat is előállíthatunk. Az értéknövelt termékek közé sorolható a xilit is, amely egyre nagyobb népszerűségnek örvend. A xilit természetes poliol, amit az élelmiszeriparban édesítőszerként használnak fel. Kémiai úton történő előállítása bonyolult és költséges folyamat, valamint alacsony termék hozamot eredményez. A mikrobák segítségével végzett xilóz- xilit konverzió, ehhez képest viszonylag egyszerű megoldást nyújthat, amely során toxikus katalizátorokat sem kell felhasználni.

Munkám során nyersanyagként búzaszalmát használtam fel, melyet savas hidrolízisnek vetettem alá, így felszabadítva a lignocellulózban található xilózt. Célom xilit előállítása volt, ezért a kapott hidrolizátumokon Hansenula anomala törzsszel xilit fermentációt végeztem.

Kezdetben híg kénsavas kezelésekkel búzaszalma hidrolizátumokat állítottam elő. A savas kezeléseket 121°C és 140°C- on, különböző időtartamokkal (5, 30 és 55 perc), össztömegekkel, savkoncentrációkkal (0,5; 1; 1,5 és 2) illetve szárazanyagtartalommal végeztem (5 és 10%). Célom a lehető legnagyobb xilóz hozamhoz tartozó optimális körülmények megállapítása, illetve minél nagyobb xilóz koncentráció elérése volt. Emellett figyelemmel kísértem azt is, hogy a kezelések során milyen koncentrációban keletkeztek a későbbi xilit fermentációra káros hatással lévő inhibitor molekulák. A kapott hidrolizátumokat detoxikációs műveleteknek vettem alá, majd Hansenula anomala törzs segítségével fermentáltam. A fermentációk során vizsgáltam a xilit koncentrációt, hozamot és produktivitást.

**TAKÁCS PIROSKA**

*tpiri94@freemail.hu*

Biomérnök

BSc, 5. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Nemestóthy Nándor  
egyetemi docens, PE MK*

---

### **Hidrogéntermelés fermentációs és bioelektrokémiai úton**

*Kulcsszavak: biohidrogén; mikrobiális üzemanyagcella; mikrobiális elektrohidrogenezis cella;*

Jelenleg számos kutatás irányul a globális energiaválság csökkentésére; a probléma megoldásának egyik útja lehet az üzemanyagcellák széles körű alkalmazása. Az üzemanyagcella olyan elektrokémiai eszköz, amely hidrogén és oxigén egyesítésével állít elő elektromos áramot. A folyamat során a kémiai energia köztes lépések nélkül, közvetlenül alakul át villamos energiává, ugyanakkor a galvánelemtől eltérően a szükséges anyagokat itt kívülről adagoljuk, maga az elektród nem fogy el.

Az üzemanyagcellákban felhasznált hidrogén termelése napjainkban elsősorban fosszilis tüzelőanyagokból hagyományos katalitikus eljárással történik, ami jelentős károsanyag-kibocsátással jár, éppen ezért új, gazdasági és környezetvédelmi szempontból is kedvező előállítási módok fejlesztésére és elterjedésére van szükség. Biohidrogén előállítása történhet különböző, mikroorganizmusok alkalmazásával történő fermentációs eljárásokkal, valamint az üzemanyagcellák egy speciális típusa, a mikrobiális elektrohidrogenezis cella alkalmazásával. A mikrobiális üzemanyagcellák olyan elektrokémiai rendszerek, melyek a mikroorganizmusok által lebontott szubsztrátból származó elektronokat közvetlenül elektromos áram termelésére fordítják. Ennek speciális típusa a mikrobiális elektrohidrogenezis cella vagy más néven mikrobiális elektrolízis cella, melyben a fent említett folyamat során keletkező elektronokat hidrogén előállítás céljából hasznosítják. A két üzemanyagcella típus vizsgálata összekapcsolódik, hiszen felépítésük hasonló, ugyanolyan biofilmet tartalmaznak, továbbá lehetséges csatolt rendszerként történő együttes alkalmazásuk.

Kutatómunkám a biohidrogén előállítására, illetve az említett bioelektrokémiai rendszerek többértű vizsgálatára irányul.

**FÓZER DÁNIEL**

*fozerd@gmail.com*

Vegyésmérnöki mesterszak

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Németh Áron*

*adjunktus, BME VBK*

*Kiss Bernadett*

*tudományos segédmunkatárs, BME VBK*

---

### **Mikroalga biofinomító upstream technológiájának fejlesztése**

*Kulcsszavak: Chlorella; Biomassza produktivitás; Optimalizálás*

Földünk töretlenül növekvő népessége az energiaigények emelkedését idézi elő, így ezt felismerve az elmúlt néhány évtizedben jelentős erőforrások összpontosultak a megújuló energiaforrásokban levő energiapotenciál hatékony kiaknázására. A biomasszákon belül kiemelt helyen szerepelnek a mikroalgák melyeket harmadik generációs biofinomítóknak feldolgozva széles skálát felölelő termékpaletta állítható elő belőlük (például bioüzemanyagok, gyógyszeripari alapanyagok, élelmiszerek, állati takarmányok). A mikroalgák a szárazföldi növényekhez képest számos előnyös tulajdonsággal rendelkeznek, ilyen a magas fotoszintetikus hatásfok és biomassza produktivitás, a nagyfokú biodiverzitás, a folyamatos üzemben megvalósítható fermentáció, valamint az atmoszféra CO<sub>2</sub> tartalmának csökkentése. A nagy volumenű fermentálást azonban mind az upstream mind a downstream folyamatoknál számos szűk keresztmetszet akadályozza. Az előbbinél ilyen a tenyésztés, ahol még nem elég robusztus a fotobioreaktorokban történő fermentálás, továbbá sokféleségükhöz képest elenyésző az izolált, magas tűrőképességgel rendelkező fajok száma, illetve mikroszkopikus sejtméretüknek köszönhetően nehéz a betakarításuk, míg az utóbbinál a konverziós utak komplexitása és egyes műveleti egységek kiugróan magas energiaigénye nehezíti a hatékony termelést. TDK munkám során a vázolt problémák közül a tenyésztési folyamatok fejlesztésére fókuszáltam. Ehhez egy választott mikroalga törzs (*Chlorella vulgaris*) két izolátumának tenyésztését Student-féle t-próbával és fénytani faktoros kísérleti tervekkel (One-way ANOVA, Central Composite terv) vizsgáltam microplate-n, majd ezek eredményét léptéknövelést követően fotobioreaktorban verifikáltam. Utóbbiakban további technológiai paraméterek (levegőztetés, fényintenzitás) hatását is újabb faktoros kísérlettervekkel határoztam meg (2x3-as ortogonális terv). A kísérlettervek kiértékelésekor a biomassza produktivitás maximalizálását tartottam szem előtt. Mérési eredményeim alapján a készülékek által szabott korlátokon belül optimalmáltam a mikroalgák tenyésztését majd modelleztem növekedésüket.

A kísérletekből nyert adatok segíthetnek a megvilágítási paraméterek sejtnövekedésre gyakorolt hatásainak megértésében, így a fotobioreaktorok megfelelő konfigurálásán keresztül tovább növelhető a mikroalgák biomassza produktivitása. Kísérleti munkámmal a mikroalga biofinomító upstream problémáinak megoldásához sikerült hozzájárulnom.



**SZÉKELY VIRÁG**

*vircsike6@gmail.com*

Biomérnöki alapképzési szak (BSc)

BSc, 6. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Laczka Csilla*

*tudományos főmunkatárs,*

*MTA TTK Enzimológiai Intézet*

---

**Új fluoreszcens esszé kidolgozása a gyógyszer farmakológiában fontos humán Organikus Anion Transzporter Polipeptidek aktivitásának vizsgálatára**

*Kulcsszavak: Organikus Anion Transzporter Polipeptid, uptake transzporter, fluoreszcens módszer, gyógyszer vizsgálatok*

Az Organikus Anion Transzporter Polipeptidek (OATP-k) olyan membránfehérjék, amelyek nagyméretű szerves molekulák sejtekbe történő felvételét segítik elő. Tizenegy humán OATP-t ismerünk, amelyek az emberi test számos szövetében expresszálódnak. Munkám során az OATP1B1, 1B3 és 2B1 fehérjékkel foglalkoztam. Ezek közül az OATP1B1 és 1B3 máj-specifikusan termelődnek, az OATP2B1 pedig kifejeződik a májban, a vékonybélben, a vér-agy gátban, a méhlepényben, a szívben és a vázizomban. Mindhárom fehérje szállít epesókat és nemi hormonokat. Ezen kívül számos, a klinikumban használt gyógyszer molekulával (például antivirális és kemoterápiás szerek, sztatinok) is kölcsönhatásba lépnek, ezért mutációik, polimorfizmusaik igazoltan eltérő gyógyszer farmakokinetikát eredményeznek. Ezen kívül OATP1B vagy 2B1 szubsztrátok egyidejű alkalmazásakor nem várt toxicitás léphet fel. Nagy igény van tehát gyógyszer molekulák és az OATP1B és 2B1 fehérjék kölcsönhatásának vizsgálatára. Munkám során az említett 3 fehérje és egy általunk újonnan felfedezett fluoreszcens OATP szubsztrát kapcsolatát jellemeztem. A festék transzportját áramlási citometriával vizsgáltam OATP1B1, 1B3 illetve 2B1 fehérjét termelő Sf9 (*Spodoptera frugiperda*) rovarsejteken. Ezt követően az új funkcionális esszét emlős sejtek használatával fluoriméterre adaptáltam, amely lehetővé teszi a módszer automatizálását. A kidolgozott esszé felhasználható molekula könyvtárak szűrésére, ezért ígéretes eszköze lehet a jövőben a farmakológiai kutatásoknak.



## **Biokémia II.**



**TIHANYI GERGELY**  
*tihanyigergely@gmail.com*  
Vegyészmérnök  
BSc, 6. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*  
*Dr. Vértessy G. Beáta*  
*egyetemi tanár, BME VBK*  
*Róna Gergely*  
*tudományos munkatárs, MTA TTK Enzimológiai Intézet*

---

### **A genomban található uracil molekulák in situ meghatározására alkalmas jelző fehérje-rendszer kifejlesztése**

*Kulcsszavak:* uracilmeghatározás; uracil-DNS-N-glikoziláz; immunocitokémia; konfokális mikroszkópia; SNAP-tag technológia

Az élőlények DNS-ében számos módosulás mehet végbe, melyek közül az egyik leggyakoribb az uracil megjelenése, amely egyrészt a citozin oxidatív dezaminációjának terméke, másrészt a DNS-polimerázok építhetik be timin helyett, melyhez szerkezetileg igen hasonló. Több enzimes család is ismert, melynek feladata az uracil kivágással történő javítása, melyek közül az emberben a legaktívabb az uracil-DNS-glikoziláz családdhoz tartozó UNG. Laboratóriumunkban korábban módosították az UNG-enzimet, így az továbbra is specifikusan képes kötődni a DNS-beli uracilhoz, ám nem vágja ki azt. Ennek segítségével képesek vagyunk különböző organizmusokból származó DNS-minták uraciltartalmát meghatározni egy általunk kifejlesztett ELISA-szerű módszerrel.

Kutatásom célja ezen módosított UNG-fehérje továbbfejlesztése volt, hogy in situ humán eredetű sejtvonalakban is jelölni tudjuk a genomi uracilt. Ehhez először emelkedett uracilszintet hoztam létre a sejtekben kemoterápiás szer (5-fluoro-2'-dezoxiuridin) kezeléssel, valamint az ung gén RNS-interferencia általi csendesítésével. A kezelések optimalizálása után sikerült kimutatnom az uracilszint növekedését a DNS-preparátumban.

Ezt követően létrehoztam egy új konstrukciót a módosított UNG- és a SNAP-tag-fehérjék fúziójával. A SNAP-tag egy újonnan felfedezett módosított fehérje, amely irreverzibilis kovalens kötést képes létesíteni fotoaktiválható benzilguanin-származékokkal, ami fluoreszcencia megjelenését váltja ki, így lehetővé téve számunkra az uracilmolekulák rendkívül érzékeny jelölését és kimutatását. Az immunocitokémiai festési eljárást először baktériumokból, majd humán sejtekből származó mintákon optimalizáltam és validáltam.

Munkám során humán vastagbélrák-eredetű sejtek genomi uracilszintjét növeltem meg különböző kezelésekkel, majd ezt in situ sikeresen jelöltem egy általam létrehozott fehérjekonstrukcióval. A módszer továbbfejlesztésével elérhető akár egyedi uracilmolekulák specifikus jelölése, illetve vizsgálható az uracil genomi eloszlása szuperrezolúciós mikroszkópia segítségével. Kutatásainkat ebben az irányban folytatjuk, így módszerünk a jövőben lehetővé teszi a genomban dinamikus módon jelen levő uracil szerepének feltárását olyan sejtbeli folyamatokban, mint az immunoglobulin-gének szomatikus hipermutációja, vagy a rákellenes terápia hatására történő uracilbeépülés.

## MÓZNER ORSOLYA

*orsimozner@hotmail.com*

Biomérnöki alapképzési szak

BSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Sarkadi Balázs*

*kutató professzor, MTA TTK Enzimológiai Intézet*

*Dr. Vértessy G. Beáta*

*tanszékvezető egyetemi tanár, BME VBK*

*Zámbó Boglárka*

*PhD hallgató, MTA TTK Enzimológiai Intézet*

---

### **Alacsony fehérje expressziót okozó ABCG2 mutációk keresése köszvényes betegekben**

*Kulcsszavak: vörösvérsejt, DNS, PCR, gélelektroforézis, qPCR*

A köszvény kialakulásának előfeltétele a megemelkedett szérumsav szint, azaz a hiperurikémia, mely – pontosan nem ismert mechanizmusok révén – vezethet a köszvényes rohamhoz, illetve vesekőhöz, valamint gyorsítja a vesével kapcsolatos keringési betegségek kialakulását. Az ABCG2 az ABC-típusú multidrog transzporterek közé tartozó fehérje, amely többek között urátot is transzportál. A fehérje a vese proximális tubulusaiban, valamint a bélben is megtalálható, ezen kívül számos szövetben – például a vér-agy gáton és a placentán - fontos szerepet tölt be a káros anyagok transzportjában. Az ABCG2 fehérje a húgysav szekréció és abszorpció egyensúlyának fenntartásában vesz részt, amely a fehérje hibája esetén az abszorpció irányába tolódik, ezáltal hiperurikémiához és köszvényhez vezethet.

Kutatócsoportunk csatlakozásom előtti áramlási citometria alapú vizsgálatainak eredményei szerint számos köszvényes betegnek alacsonyabb az ABCG2 fehérje szintje az átlagoshoz képest a vörösvértestek membránjában. A szakirodalomban a fehérje több variánsa (így a V12M, Q141K) ismert, amelyek esetében a fehérje szintje csökkenhet, vagy a transzporter funkciója károsodhat. Céлом az említett korábbi kutatások során kiugróan alacsony ABCG2 fehérje expressziót mutató betegek és kontroll donorok vérmintáiból DNS izolálása és a fehérjét kódoló régió genetikai vizsgálata volt. Munkám során több mintában sikerült megtalálnom a fehérje ismertebb, gyakori variánsait, a Q141K-t és a V12M-et. Ezek mellett más mutációkat is találtam, melyek magyarázatot adhatnak a jelentősen alacsonyabb, akár felére csökkent ABCG2 fehérjeszintre a vörösvértestek membránjában. Az egyik beteg vérmintájában egy stop variánst sikerült kimutatnom az egyik allélon (R236X), amely a fehérje korai terminációjával és lebomlásával jár. Másik két – a normál átlaghoz képest mintegy felére csökkent expresszióval rendelkező - mintában pedig egy eddig a szakirodalom számára ismeretlen mutációt (M71V) találtam, heterozigóta formában. Munkámból kiindulva kutatócsoportunkban elkezdődött az M71V mutáció hatásának vizsgálata az ABCG2 fehérje stabilitására és traffickingjére, valamint tervezem a továbbiakban nagyobb számú köszvényes és normál vérmintán qPCR-es módszerrel a mutáció előfordulását vizsgálni. Lehetséges, hogy ez a mutáció a magyar populációban gyakoribb, mint azt az adatbázisokban leírták, és fontos tényező lehet Magyarországon a hiperurikémia, valamint a köszvény kialakulásában.

**HARKAI ÁKOS**

*akos.harkai@gmail.com*

Biomérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Mészáros Tamás*

*egyetemi docens, SE ÁOK*

---

### **Aptamer szelekció in vitro transzlált humán miokardiális prohormonra**

*Kulcsszavak: molekuláris biológia; aptamer; SELEX; in vitro transzláció*

A szívelégtelenség szerteágazó kivizsgálásában az egyszerű laboratóriumi paramétereken túl többféle biomarkert igyekeznek használni a klinikai kémiai gyakorlatban. A nátriuretikus peptideknek több típusa is ismeretes, amelyek főleg nátriuretikus és diuretikus hatásuk révén befolyásolják a szervezet folyadék-, és elektrolit háztartását, annak finomszabályozásában vesznek részt. Számos klinikai tanulmány igazolta már, hogy a B-típusú nátriuretikus peptidhormon több formája a vérben szignifikánsan magasabb koncentrációban van jelen a különböző akut és krónikus szívelégtelenségben szenvedők esetében.

A gyorsan fejlődő molekuláris biológiai módszerek közül egyre több már az egészségügyi rutinvizsgálatok részévé vált. A XX. század utolsó éveiben sikerült először a molekuláris darwinizmus elméletét (SELEX, Systematic Evolution of Ligands by EXponential enrichment) alkalmazva szintetikus oligonukleotid alapú, fehérjére szelektív aptamereket létrehozni. A célmolekulára specifikus konformációt felvevő aptamer molekula kellően alacsony disszociációs állandóval képes kötődni, ezzel lehetővé téve a szelektív, pontos és gyors kimutatást.

Amennyiben a célmolekula egy, a humán keringésben kis koncentrációban jelenlévő fehérje, esetleg hormon, elgondolkodtató feladat annak megfelelő mennyiségben, stabil, ám mégis natív, nagy tisztaságú formában való kinyerése. Ilyen esetekben az adott fehérje előállítása in vitro transzlációval célravezető megoldás lehet, hiszen ezzel a módszerrel az említett kívánalmaknak eleget tehetünk.

Az Egészségügyi Világszervezet (WHO) 2012-es felmérése szerint a tíz vezető halálok között szerepel az iszkémiás és a magas vérnyomással járó szívbetegség is. Ezen adatok tudatában indokolt olyan újfajta, aptamereken alapuló diagnosztikai eljárások fejlesztése, amelyek hozzájárulhatnak a kóros elváltozások korai felismeréséhez, a betegség súlyosságának megítéléséhez, illetve a kezelés eredményességének ellenőrzéséhez.

Munkám célja a humán keringésben megjelenő proBNP-re specifikus aptamerek szelektálása. Ennek megvalósításához sejtmentes transzlációs rendszerben a célmolekula előállítására, majd egy többciklusos folyamatban – különböző módon változtatva a szelekciós nyomást – az aspecifikus aptamerek kiválogatására van szükség. Végül a potenciálisan specifikus aptamerek elsődleges és másodlagos szerkezetét in silico módszerekkel vizsgálom meg, ami a későbbi kvantitatív vizsgálatok alapját adja meg.

**FÁBIÁN ZITA**

*fabianzit@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezető:*

*Gyurcsik Béla*

*egyetemi docens, SZTE TTIK*

---

## **Az NColE7-alapú mesterséges metallonukleázok szerkezeti aktiválási lehetőségének vizsgálata**

*Kulcsszavak: NColE7; cinkujj; metallonukleáz; cirkuláris dikroizmus; fehérje kristályosítás*

Kutatócsoportunk célja egy olyan szabályozott működésű, katalitikus hatású fehérje kifejlesztése, amely felismer egy általunk kiválasztott DNS szekvenciát, és ott a DNS szálát specifikusan hasítja el.

A megtervezett fehérjék alapjául a cinkiont tartalmazó Colicin E7 nukleáz doménje (NColE7) szolgált, melynek katalitikus és szabályozó szegmenseit linker szekvenciákon keresztül egy három cinkujjból álló – a kiválasztott specifikus DNS szekvencia felismerését szolgáló – fehérje két végéhez kapcsolták [1]. Különböző hosszúságú NColE7 szegmenseket felhasználva, három mesterséges nukleáz molekulát alakítottak ki, melyek oldatbeli szerkezetét, illetve Zn(II)-ionokkal és DNS-sel kialakuló kölcsönhatásait CD spektroszkópia segítségével vizsgáltam.

Az NColE7 különleges tulajdonsága, hogy az enzim aktivitásához a katalitikus és szabályozó szegmensek egymáshoz közeli elhelyezkedése és kölcsönhatása szükséges. A két terminális rész távolsága a fehérje harmadlagos szerkezetében fluoreszcencia spektroszkópiával tanulmányozható a W464 aminosav oldalláncának kölcsönhatásain keresztül. Ez az aminosav alapvetően befolyásolja a fehérjében található fémkötőhely szerkezetét, alaninra cserélve a fehérje (W mutáns) szerkezete összeomlik, fémion-affinitása az NColE7-hez képest nagymértékben lecsökken [2]. Érdekessége ennek a fehérjének, hogy szerkezete a szubsztrát, illetve az ún. immunitás fehérje (Im7) jelenlétében helyreáll. A W mutáns indukált szerkezetének tanulmányozása céljából előállítottam a W/Im7 fehérjekomplexet, majd fehérjekristályosítási kísérleteket végeztem. Ezeknek célja az volt, hogy megérthessük a W464 aminosav szerepét, és további szabályozási lehetőségként felhasználjuk ezt a mesterséges nukleázok kialakításában.

[1] E. Németh, G.K. Schilli, G. Nagy, C. Hasenhindl, B. Gyurcsik, C. Oostenbrink, J. Comp-Aid. Mol. Des., 28, 841–850(2014)

[2] E. Németh, M. Kožíšek, G.K. Schilli, B. Gyurcsik, J. Inorg. Biochem., 151, 143–149 (2015)



**JAKAB MIKLÓS**  
*jakab993@gmail.com*  
Biomérnök alapszak  
BSc, 9. félév

Pannon Egyetem  
Mérnöki Kar

*Témavezető:  
Dr. Gubicza László  
egyetemi tanár, PE MK*

---

### **Az ureáz enzim alkalmazhatóságának vizsgálata biocement előállítására**

*Kulcsszavak: ureáz, kalcit, keménységmérés, röntgendiffrakció, derivatográf*

Bizonyos baktériumok, speciális körülmények között, képesek homok mátrixban kalcium és karbonát ionból kalcitot (mészkő) előállítani, majd azt a homokkal összeépítve egy cementhez nagyon hasonló anyagot létrehozni. Ez a képesség az egyes baktérium törzsekben termelt ureáz enzimnek köszönhető, amely a világon szinte mindenhol megtalálható karbamid (urea) hidrolízisét végzi. Ha a hidrolízis kalciumban gazdag közegben megy végbe, akkor a reakció során keletkezett karbonát hatására az oldatban szilárd kristályos anyag jelenik meg. A kicsapódott kristályok kötési erőssége nagymértékben függ a keletkezett karbonát ionok mennyiségétől. A paraméterek megfelelő megválasztása mellett lehetséges erősen kötő kalcit cementet előállítani. Munkám során azt vizsgáltam, hogy tiszta ureáz enzim készítményből előállított kalcit cement összetételében és fizikai tulajdonságaiban mennyire hasonlít a manapság építőiparban alkalmazott kötőanyagokhoz.

A vizsgálatokhoz szükséges minták előkészítése az összetevők és azok paramétereinek tudatos változtatása mellett történt. A cél elsősorban az alkalmazott szemcsék optimális méretének illetve az enzim megfelelő koncentrációjának a meghatározása volt. A biocement szilárdsági tulajdonságai a felületen mért keménységi értékük alapján kerültek összehasonlításra, amelyhez egy alkalmas mérőberendezést alakítottam ki. Az így kapott értékek szabványos keménységi eljárásoknak megfelelő mérőszámokkal nem összevethető értékek, mégis alkalmasak tűnnek az enzim függvényében mért szilárdságának kvalitatív összehasonlítására. A minták pontos összetételének vizsgálata röntgendiffrakciós elemzéssel történt, melynek célja a kötésben résztvevő komponensek mennyiségi és minőségi meghatározása volt. A reakcióközegben keletkezett kalcium-karbonát mennyiségének meghatározását a derivatográfus vizsgálatok segítették. Kutatómunkám eredményeképpen sikerült a szemcseméretre és az ureáz koncentrációjára vonatkozóan annak a tartománynak a szűkítése, amely határokon belül jó esély van a vizsgált kötési mechanizmus alkalmazhatóságára.

**KISS KRISZTINA**

*kisskriszti21@hotmail.com*

Kémia

BSc, 10. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Mező Gábor*

*tudományos tanácsadó, ELTE TTK*

---

### **Fág könyvtárból kiválasztott irányító peptid szerkezetének optimalása célzott tumorterápiához**

*Kulcsszavak: vastagbél tumor; fág bemutatás; daunomicin; peptidkonjugátum*

A vastagbélrák napjaink egyik leggyakoribb rákos megbetegedése. 2012-ben 1,4 millió új esetet regisztráltak világszerte. [1] Az esetszámok kimagaslóan magasak a Közép-Európában így Magyarországon is. Ezért különösen fontosak a vastagbél daganatok gyógyítására irányuló kutatások. Az utóbbi időben egyre nagyobb figyelem irányul az irányított tumorterápiára. Zhang és munkatársai fág bemutatás során véletlenszerűen választottak ki 50 fág-klónt, melyek közül a VHLGYAT szekvenciájú heptapeptidet találták a HT-29 sejtekhez legnagyobb szelektivitással kötődő irányító molekulának. [2] Ugyanakkor a kiválasztási mód miatt lehetőséget láttunk a peptid szerkezetének további optimalásra még hatékonyabb irányító molekula előállítására érdekében. Kutató munkám során, a korábbi eredményeim alapján kiválasztott, HT-29 vastagbél tumorra specifikus (Dau=Aoa-LRRY-VHLGYAT-NH<sub>2</sub>) peptid-hatóanyag konjugátum szerkezetének optimalásával foglalkoztam. Az aminooxiecetsavval (Aoa) meghosszabbított LRRY enzimlabilis tetrapeptid spacer megtartottam a továbbiakban is a szekvenciában. Az aminooxiecetsav lehetővé teszi, hogy a daunomicint (hatóanyagot) oxim-kötéssel keresztül kapcsoljam a peptidhez. Elsőként az irányító peptid (VHLGYAT) klasszikus alanin-szkennelését végeztem el. A konjugátumokat HPLC-vel és tömegspektrometriával jellemeztem, citosztatikus hatásukat MTT teszt segítségével határoztuk meg, sejtbefutásukat pedig áramlási citometriával vizsgáltuk. Mivel az eredmények alapján az eredeti szekvenciában a Gly bizonyult cserélhetőnek, így a helyére további különböző karakterű aminosavakat építettem be. A konjugátumokat a korábbiakhoz hasonlóan jellemeztem.

A pozíciós-szkennelés eredményei azt mutatták, hogy a nagy térkitöltésű hidrofób karakterű aminosavak (F, L, T) beépítése esetén jobb a konjugátumok in vitro citosztatikus hatása. Továbbá pozitív töltéssel rendelkező aminosav, valamint Pro beépítése nem megegyezett. A konjugátumok citosztatikus hatásának sorrendje a beépített aminosavak alapján a következőként alakult:

$$F \cong L > T \geq S \cong A \cong N \cong E > G \geq K > P$$

A kapott eredmények alapján, a későbbiekben érdemes foglalkozni a peptid-hatóanyag konjugátumok további szerkezet optimalásával más aminosavak (pl. Ile, Trp, Tyr), illetve oldékonyságot növelő spacer beépítésével beépítésével, így növelve a hatékonyságot.

[1] [http://www.wcrf.org/cancer\\_statistics/data\\_specific\\_cancers/colorectal\\_cancer\\_statistics.php](http://www.wcrf.org/cancer_statistics/data_specific_cancers/colorectal_cancer_statistics.php)

[2] Y. Zhang, et al.; J. Biomol. Screen., 12, 429-435 (2007)

**TORDAI KLAUDIA TERÉZ**

*tordaiklaudia@gmail.com*

Gyógyszervegyész-mérnöki mesterképzési szak

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Marosi György*

*egyetemi tanár, BME VBK*

*Dr. Nagy Zsombor Kristóf*

*egyetemi adjunktus, BME VBK*

---

### **Folyamatos üzemű nedves granulálási eljárás fejlesztése**

*Kulcsszavak: glükóz, tablettá, kétcsigás extrúder, granulátum*

A keményítő enzimatisz hidrolízisével kapott szőlőcukor jelentős mennyiségben kerül felhasználásra az élelmiszeriparban, ugyanakkor gyógyszeripari felhasználása sem elhanyagolható például tabletták segédanyagaként. Azonban a kristályosítással kapható, nagy finom por frakciót tartalmazó szőlőcukor nem megfelelő gördülékenységű és tablettázhatóságú, ami komoly nehézségeket okozhat pl. adagolásakor szállításakor, vagy feldolgozásakor. Az ilyen típusú szőlőcukor hajlamos a beboltozódásra, összeáll tömbökké, így nem adagolható megfelelően, valamint préselés során kis szilárdságú tabletták készíthetők csak belőle.

Munkám célja az volt, hogy technológiát dolgozzak ki egy jól gördülő, jól tablettázható szőlőcukor granulátum előállítására, mely technológia lehetőség szerint folyamatos üzemű gyártásra is alkalmas. Kísérleteim során egy szakaszos nedves granulálási eljárás mellett új típusú folyamatos nedves granulálási eljárást is fejlesztettem. Részletesen vizsgáltam a folyamatos nedves granulálási technológia paraméterfüggését, továbbá azt, hogy az utókezelések (pl. szárítás, őrlés módja), milyen hatással vannak az előállított granulátumok minőségére. A szőlőcukor granulátumok nedvességtartalmát termogravimetriával, gördülékenységét kifolyási sebesség mérővel, szemcseméret eloszlását lézerdiffrakcióval, kristálymorfológiáját differenciális pásztázó kalorimetriával és Raman spektroszkópiával vizsgáltam. A granulátumokat tablettáztam, majd mértem a gyártott tabletták törési szilárdságát, és összehasonlítottam a granulátatlan porból gyártott tabletták szilárdságával. A vizsgálatok alapján megállapítottam, hogy a kidolgozott technológia megfelelő minőségű terméket eredményez, és méretnövelés után integrálható a folyamatos szőlőcukor gyártás technológiai sorába.

**ADORJÁN AFRODITÉ EMESE**

*adorjanaafrodite@gmail.com*

Kémia

BSc, 8. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Mező Gábor*

*tudományos tanácsadó, ELTE TTK*

*Pethő Lilla*

*PhD. hallgató, ELTE TTK*

---

## **HER2 receptort célzó peptid és analógjainak szerkezet-hatás összefüggése a célzott tumorterápiában**

*Kulcsszavak: ErbB2; fág könyvtár; MD modellezés; fluoreszcensen jelzett peptidek; áramlási citometria*

A mellrák az egyik leggyakoribb daganatos megbetegedés világszerte. Az esetek 20%-ánál HER2/ErbB2 (humán epidermális növekedési faktor receptor 2-es típusa) pozitív rákot diagnosztizálnak, amelyre agresszív betegségfolyás jellemző a HER2 túlexpresszáldása miatt. Napjainkban a célzott tumorterápia a kutatások rendkívül aktív részét képezi, amely azon alapul, hogy tumorsejt-specifikus receptorokat céloznak irányító molekulához kapcsolt tumorelleses hatóanyaggal. Egyre elterjedtebb ilyen célpontú peptidek feltérképezése fág könyvtárak, és molekula dinamikai (MD) modellezések által.

Munkám során egy fág könyvtárból kiválasztott peptid (KCCYSL) [1] analógjait állítottam elő és in vitro sejtbejutásukat vizsgáltuk. Két ciszteint helyettesítettem alaninnal, szerinnel, és az esetlegesen fellépő oxidáció gátlására Acm védőcsoporttal védett ciszteint építettem be. Két glicin tartalmú analógot is szintetizáltam, hogy megvizsgáljam, a ciszteinek közötti távolság növelése milyen hatással van a receptorcélzásra. Az analógok megépítése után egy tanulmány alapján kiválasztottam két olyan, MD szimulációs vizsgálat alapján feltérképezett peptidrészletet (GWWNPT, GYYNPT), amelyről megállapították, hogy kötődnek HER2 receptorhoz [2]. Így ezeket kombináltam a fentebb említett alaninnal helyettesített analóggal. A variánsokhoz 5,6-karboxifluoreszcint kapcsoltam mint fluoreszcens jelölőmolekulát. Az in vitro sejtbejutást áramlási citometriával vizsgáltuk MDA-MB-453 HER2+ humán emlőkarcinóma sejteken.

Az eredményekből megállapítható, hogy a KCCYSL analógok esetében a ciszteinek közötti távolság növelése rontja a peptid in vitro internalizációját, míg a többi analógnál a sejtbevitel mértéke közel azonos volt az eredeti peptidével. A szerin tartalmú variánsoknál jobb oldékonyságot tapasztaltunk. A KAAAYSL és a GWWNPT/GYYNPT peptidek kombinációjának sejtbevitelére már kis koncentráció értéknél is kimagasló volt, az egyedi komponensekhez képest. Ezen eredmények alapján tervezzük a szerin tartalmú KCCYSL analógok és a GWWNPT/GYYNPT peptidek kombinációjának szintézisét, illetve tumorelleses hatóanyaggal való konjugátumok előállítását különböző enzimlabilis spacereken keresztül.

[1] Karasseva, N.G., et al.; J. Prot. Chem., 21, 287-296 (2002)

[2] Geng, L., et al.; Theranostics, 6, 1261-1273 (2016)

**PERCZE KRISZTINA**

*k.percze@gmail.com*

Biomérnök

MSc, 11. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:  
Dr. Mészáros Tamás  
egyetemi docens, SE*

---

### **Vírusdetektálás aptamerekkel**

*Kulcsszavak: aptaszenzor; RSV; SELEX; diagnosztika; AlphaScreen*

A humán vírusok azonosítását és diagnosztizálását nagyban megnehezíti a vírusok gyors mutációja, ezért különösen fontos olyan vírusdiagnosztikai módszerek fejlesztése, melyek fel tudják venni a versenyt a vírusok evolúciós sebességével. A jelenleg alkalmazott direkt vírusdetektálási módszerek közé tartozik a víruskultúrák izolálása és kitenyésztése, mely időigényes, a valósidejű PCR, mely magas költségekkel jár és az antitest alapú módszerek, melyek alkalmazásának határt szab a nagy szelektivitású antitestek előállításának összetettsége. Az utóbbi módszer hiányosságaira nyújthat megoldást az aptamerek használata.

Az aptamerek 20-80 nukleotid hosszú, egyszálú oligonukleotidok, melyek képesek célmolekuláikat nagy affinitással és specifitással felismerni, előállításuk in vitro szelekcióval történik, melynek körülményei igény szerint megválaszthatók. Továbbá az aptamer szelekció gyorsasága lehetőséget teremt a mutációk következtében újonnan megjelenő vírusokkal lépést tartó diagnosztikai módszerek fejlesztésére.

Kutatásunk célja olyan specifikus aptamerek szelektálása volt, melyek alkalmasak az RSV humán eredetű biológiai mintákban történő kimutatására. Az aptamerek szelekcióját módosított SELEX eljárással, mágneses gyöngyön immobilizált, inaktivált RS vírussal kiviteleztek. Ezt az aptamerek szekvenálása követte, a kapott eredményeket in silico vizsgálatnak vetettük alá. Az így kiválasztott, potenciálisan RSV szelektív aptamereket metodikailag alapvetően eltérő megközelítéssel kívántuk karakterizálni, DotBlot és AlphaScreen módszerekkel. A DotBlot módszer a nitrocellulóz membránon immobilizált vírusok és fluoreszcensen jelölt aptamerek kölcsönhatásának analízisét teszi lehetővé, az AlphaScreen pedig egy homogén, immobilizálást nem igénylő, molekuláris kölcsönhatások vizsgálatára kidolgozott módszer. Az AlphaScreen segítségével megerősítettük a DotBlot-tal nyert eredményeinket. Mindemellett az AlphaScreen módszer érzékenysége lehetővé tette az RSV kimutatását klinikailag relevánsnál alacsonyabb vírustiter értékű garatkenetekben. Mindezek alapján aptamereink további fejlesztéseket követően alapját képezhetik az RSV gyors és költséghatékony diagnosztikájának.



# **Élelmiszer kémia és élelmiszer analitika**





**DÉVÉNYI DÁNIEL**

*danie19940107@gmail.com*

Vegyésszmérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnök és Biomérnök Kar

*Témavezető:*

*Dr. Székely Edit*

*egyetemi docens, BME VBK*

---

**Alkaloid koncentráció szabályozása macskakarom (*Uncaria Tomentosa* [Willd.] DC)  
kivonatokban hagyományos kevertetési extrakcióval**

*Kulcsszavak: Gyógynövény; antioxidáns hatás; vizes-alkoholos extrakció; optimalizálás; citromsav*

A macskakarom (*Uncaria tomentosa* [Willd.] DC) egy Amazonas erdei kúszónövény, tradicionálisan indián gyógynövény. Világszerte ajánlják ízületi bántalmak csökkentésére és általános immunerősítőként, daganat- és vírusellenes hatását is feltételezik. A növény gyógyhatását a kérgében található pentaciklusos alkaloidok, triterpének, flavonoidok és tanninok adják. A gyógynövény- és kivonatainak alkalmazását a világ számos országában széleskörűen engedélyezik (pl.: USA, Ausztria), míg más országokban, köztük hazánkban is, a magas alkaloidtartalma miatt korlátozzák. A kutatómunka célja az alkaloidtartalom szabályozása a kivonatokban hagyományos extrakciós eljárással, amely egy további termékfejlesztés és alkaloidtartalomra való standardizálás alapja lehet.

A munkám során örölt macskakarom kéregből víz, abszolút etanol, 50:50 víz – etanol, illetve előbbi oldószerek különböző citromsav tartalmú oldataival három lépéses hagyományos kevertetési extrakcióval kivonatokat készítettem, amely során az extraháló oldószer összetétele, a hőmérséklet, extrakciós idő és a lépésszám hatását vizsgáltam a kivonat alkaloid-koncentrációjára és a citromsavtartalommal korrigált termelésre.

Az extrakció hőmérsékletének vizsgálatai során a 70°C bizonyult a legmegfelelőbbnek, mivel ezen a hőfokon volt a legnagyobb az alkaloid-koncentráció és a korrigált hozam. Az extrakciós idő 0,5 – 2 óra tartományban már nem befolyásolja az extrakciós hatékonyságot, valamint a három lépés elengedő. Az etanol és a citromsav együttes hatásának vizsgálatát egy 32 kísérlettervvel végeztem. Megállapítottam, hogy citromsav oldat felhasználásával jól ismételve 5 – 37,3 mg alkaloid/ g extrakt tartományban szabályozható a kivonat alkaloid koncentrációja. Maximális alkaloid-koncentráció a kivonatban citromsavmentes abszolút etanol alkalmazásával érhető el. A korrigált termelés optimuma 50:50 víz – etanol oldószer esetén 1 – 1,2 tömegszázalék citromsav tartalom. A kivonat tannin mennyiség és szabadgyök-fogó képesség vizsgálata során, arra a következtetésre jutottam, hogy a macskakarom kivonatok antioxidáns hatásáért feltehetőleg a tanninok a felelősek. Az 50:50 víz – etanol oldószerezrel kapott kivonat tannin tartalma igen magas,  $25,08 \pm 1,14$  % és gyökfogó hatása is kiváló.

A vizsgálataim során kapott eredmények lehetőséget biztosíthatnak egy alkaloidra standardizált termékfejlesztésre viszonylag olcsó és könnyen megvalósítható üzemi technikával.

**KEREZSI NIKOLETT DÓRA**

*kerezsi.nikolett.dora@gmail.com*

Biológia

BSc, 7. félév

Eszterházy Károly Egyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Dr. Bóka Beáta*

*főiskolai docens, EKE TTK*

---

### **Bioszenzoros módszerek fejlesztése és alkalmazása élelmiszerek L-glutamát tartalmának meghatározására**

*Kulcsszavak: analitika; amperometriás bioszenzor; enzimszenzor; élelmiszeranalitika; ízfokozó*

Az L-glutaminsav nem-esszenciális fehérjealkotó aminosav, amely az élelmiszerekben mind szabad, mind fehérjében kötött formában megtalálható. Szabad formában ízfokozó hatású és az úgynevezett „umami” ízt okozza, melyet az ötödik alapíznek tekintenek. Különböző sóit ételízesítőként használják, közülük legismertebb a nátrium-glutamát (MSG, E621). A glutamát emellett egy fontos neurotranszmitter. A glutamát szint markerként szolgálhat különféle betegségek (skizofrénia, Alzheimer illetve Parkinson kór, epilepszia) diagnózisa során. A glutamát mennyiségi meghatározása tehát mind az élelmiszer analitika, mind a klinikai diagnosztika területén belül jelentőséggel bír.

Munkám során az Eszterházy Károly Egyetem Bioszenzor laboratóriumában folyó kutató munkába kapcsolódtam be, melynek végső célja a glutamát tartalom gyors meghatározására alkalmas, enzim alapú amperometriás bioszenzor fejlesztése, amely az élelmiszerek széles körében alkalmazható. Ezen belül a feladatom az optimálási szakaszban különböző összetételű elektródok tesztelése, majd a kifejlesztett módszer valós élelmiszerminták analízisére történő alkalmazása volt. A vizsgált termékek (szójaszószok, leveskockák, bögrés levesek, fűszerkeverékek, ízesítők, salátaöntetek, sajtok, chipsek) között hozzáadott nátrium-glutamátot tartalmazó és MSG-mentes is található.

A bioszenzorban használt enzimelektrodok felszínén glutamát oxidáz (GLOx, EC 1.4.3.11) és torma peroxidáz (HRP, EC 1.11.1.7) enzimeket rögzítettünk poli(etilén-glikol)(400) diglicidil éter (PEGDGE) keresztkötővel. Az enzimelektrodot munkaelektrodként alkalmaztuk egy wall-jet típusú elektrokémiai cellában, amely egy Ag/AgCl referencia elektrodot és Pt segédelektrodot is tartalmazott. A bioszenzorunk folyamatosan áramló injektálós (Flow Injection Analysis, FIA) rendszerben működik. A QuadStat 164 (eDAQ, USA) típusú potenciosztát segítségével amperometriás detektálást alkalmaztunk. Az optimális elektród-összetétel: 12 mU GLOx, 5U HRP, 5 µg PEGDGE. A glutamát bioszenzor lineáris mérés tartománya 0,001-0,1 mM, a kimutatási határ 1 µM.

A vizsgált élelmiszer minták esetén a glutamát bioszenzorral mért értékeket HPLC analízis eredményeivel hasonlítottuk össze és jó egyezést tapasztaltunk.

**GYERGYÓSZEGI ZSÓFIA**

*gyergyoszegi.zs@gmail.com*

Kémia

BSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Eke Zsuzsanna*

*egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

*Nyiri Zoltán*

*PhD hallgató, ELTE TTK*

---

### **Élelmiszerrel érintkező műanyagokból kioldható degradációs termékek vizsgálata**

*Kulcsszavak: műanyag; szennyező; GC-MS;*

Napjainkban a műanyag csomagolóanyagok gyártására során egyre nagyobb figyelmet fordítanak a felhasználók biztonságára. Az Európai Unióban a 2011/11/EK rendelet szabályozza az élelmiszerekkel rendeltetésszerűen érintkezésbe kerülő műanyagokhoz felhasználható adalékanyagok körét. Az engedélyezett adalékanyagok esetén a rendelet megadja az élelmiszerekbe történő kioldódásuk maximális határértékét is. Az élelmiszerrel való érintkezés során a műanyagokból kioldódhatnak azonban olyan vegyületek is, amelyek nem tervezetten kerültek az adott csomagolóanyagba. Ezek egyaránt származhatnak a gyártáshoz használt anyagok szennyezőiből, a gyártás során bekövetkező mellékreakciókból vagy keletkezhetnek a gyártást követően, a műanyag szállítása, tárolása, felhasználása során. Az így létrejövő vegyületek feltételezhetően nem engedélyezett a fent említett rendeletben foglalt szabályozás szerint.

Munkám során az élelmiszerekkel rendeltetésszerűen érintkezésbe kerülő egyes műanyagok gyártását követő változásait kívántam vizsgálni. Célul tűztem ki, hogy felderítsem, a mindennapi igénybevétel során keletkezhetnek-e kimutatható mennyiségben olyan nem engedélyezett anyagok kereskedelmi forgalomban kapható műanyag kések, poharak, tálak és tányérok esetén, melyek az élelmiszerbe kerülhetnek. Vizsgáltam az UV-fénnyel való besugárzás, 50 és 70 °C-n történő tárolás, és a mikrohullámú sugárzás hatását. A vásárolt műanyag eszközökből a kioldódás vizsgálatokat a kezelés előtt és után az érvényben lévő Európai Uniók rendeletnek megfelelően végeztem el.

A műanyagokból kioldható anyagok egyértelműen nem voltak azonosíthatók, a mérési eredmények alapján mégis elmondható, hogy a vizsgált hatások nem befolyásolják a vizsgált műanyagok biztonságosságát. Ugyanis a műanyagokból ezen hatásoknak való kitétel után csak olyan komponensek oldódtak ki, amik a roncsolatlan mintákból is mérhetőek voltak. Ezen mindkét esetben detektálható komponensek pedig nem jelentek meg jelentősen nagyobb mennyiségben a roncsolt mintában.

**KUBOVICS MÁRTA**

*kubomarti@gmail.com*

Vegyésszmérnök

BSc, 6. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Székely Edit*

*egyetemi docens, BME VBK*

*Huszár György*

*Termeltetési vezető, Taravis Baromfi és Élelmiszeripari Kft.*

---

### **Galagonya kivonatok készítése, elemzése, valamint szív és érrendszerre történő hatásának vizsgálata**

*Kulcsszavak: extrakció; galagonya; baromfi; szív és érrendszer; itatási kísérlet*

Dolgozatom célja a hagyományos gyógynövényként ismert galagonya szív és érrendszerre történő hatásának vizsgálata egy olyan területen, amelyről tudomásunk szerint még nem készültek tanulmányok.

Évek óta fennálló probléma a baromfihús feldolgozó iparágazatban, hogy a lerövidített nevelési idő miatt az állatok szervezeti szilárdsága nem megfelelő. A feldolgozó üzemben – az állatvédelmi törvény előírásainak megfelelően - elektromos árammal kábítják el vágás előtt a baromfikat. Az áramütés hatására a mellcsúcsban, a belső filében a nem kellően kifejlődött, megerősödött hajszálerek megpattannak, bevérzéseket okoznak, amelyeket a piaci igényeknek megfelelően el kell távolítani. Az így keletkező mellnyesedék gazdasági értéke jóval alacsonyabb a legértékesebb húsrésznél, a mellfilénél. Célunk itatási kísérletekkel alátámasztani, hogy a szív és érrendszerre bizonyítottan jótékony hatásokkal rendelkező galagonya alkalmazásával csökkenthető a bevérzés mértéke. Munkám során labor méretű Soxhlet, félüzemi Soxhlet és félüzemi szuperkritikus szén-dioxidos extrakciót végeztem. Az elkészített kivonatok összehasonlítottam az elért kihozatal alapján, illetve analitikai vizsgálatokat végeztem a biológiailag aktív komponensek feltérképezésére. A szakirodalom alapján a szív és érrendszerre gyakorolt jótékony hatás nagy részben a polifenoloknak köszönhető. Az analitikai vizsgálatok során a polifenolok mennyisége az irodalmak alapján a vártnak megfelelő volt, azonban a flavonoidokat csak kis mennyiségben tartalmaztak a kivonatok, míg az extraktok antioxidáns hatása közepesnek mondható a referenciaként használt butil-hidroxi-toluolhoz képest. Az itatási kísérlet során 100 csirkén vizsgáltuk a 96%-os etanol oldószerrel kivont félüzemi Soxhlet extraktból készített oldat hatását a bevérzés mértékére. Referenciaként 100 olyan csirkét használtunk, amelyeknek nevelési körülményei között az egyetlen számottevő különbség az itatott anyag volt. Az itatási kísérletek eredményesnek bizonyultak, a Minőség ellenőrzési osztály által végigkövetett vizsgálatban láthatóan csökkent a bevérzés mértéke, illetve a keletkezett mellnyesedék mennyisége nagyjából háromszoros mértékű a kezeletlen csoport esetén.

Az itatási kísérletek eredményei alapján a galagonya alkalmazható csirkék esetében a mellhúsban keletkező bevérzés mértékének csökkentésére, azonban további kísérletek szükségesek a hatás növelésére és a piacképes terméket eredményező formuláció kialakítására.

**GERGŐ DOROTTYA**

*gergo.dorottya@gmail.com*

Biológia

BSc, 6. félév

Eszterházy Károly Főiskola

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Molnár Szabolcs*

*tudományos segédmunkatárs,*

*Élelmiszertudományi és Borászati Tudásközpont*

---

## **Hazai és külföldi propolisz minták flavonoid összetételének műszeres analitikai vizsgálata és statisztikai elemzése.**

*Kulcsszavak: propolisz; polifenol; GC-MS; PCA*

### **1. Bevezetés és célkitűzés**

A propolisz egy sötét színű, gyantaszerű anyag, amit a háziméh (*Apis mellifera* L.) gyűjt. Kutatásunk során gázkromatográffal kapcsolt tömegspektrométerrel (GC-MS) vizsgáltuk a propolisz származék képzés útján illékonyá tett polifenol komponenseit. Ezzel a technikával pontos információ nyerhető a biológiailag aktív összetevők azonosítására és mennyiségi meghatározására. Célunk a növényföldrajzi elemzés és értékelés, eredményeink összehasonlítása cönológiai adatbázisokkal, lehetővé téve ezáltal a propolisz minták földrajzi zónák szerinti digitális feldolgozását és ábrázolását, hogy egzakt képet kaphassunk az adott területről gyűjtött minták összetétele és az ahhoz a területhez tartozó vegetáció kapcsolatáról. Feladatunk matematikai modell felállítása a statisztikai elemzéshez PCA, illetve klaszteranalízis segítségével. 269 hazai és 5 külföldi mintát vizsgáltunk meg. Az MS teljes adatállománya nemzetközi szakirodalom alapján eredetvédelemhez hasznosítható. Mindeztől ilyen átfogó vizsgálat Magyarországon nem volt, világszinten is ritka.

### **2. Anyag és módszer**

#### **2.1. Vizsgálandó minták begyűjtése**

A mintákat az Országos Magyar Méhészeti Egyesület közreműködésével, az ország megyéinek különböző településeiről kaptuk, a begyűjtést a méhészek végezték.

#### **2.2. Minta előkészítés és analitikai vizsgálat**

A nyers, porított propolisz mintákon származékképzési eljárást (trimetil-szilil képzés) hajtottunk végre. Shimadzu GC 2010 gázkromatográffal végeztük a komponensek elválasztását, míg az azonosítást és mennyiségi meghatározás Shimadzu GCMS QP2010S típusú tömegspektrométerrel történt.

#### **2.3. Főkomponens vizsgálat (PCA), klaszter analízis és cönológiai elemzés**

Statisztikai módszerek segítségével elemeztük az összegyűjtött adatokat, illetve kerestük a hasonlóságot és eltéréseket az egyes régiók között. Ezt követően cönológiai adatbázis és a tömegspektrumaink felhasználásával összehasonlító elemzést végeztünk.

### **3. Eredmények és értékelésük**

A GC-MS eredmények alapján a magyar mintákban a 7 legjellegzetesebb polifenolos vegyület a fahéjsav, p-kumársav, ferulasav, kávésav, krizofanol, emodin és a kempferol. Eredményeinket cönológiai adatbázisokkal vetettük össze, illetve statisztikai elemzést végeztünk rajtuk főkomponens vizsgálat és klaszteranalízis segítségével.

### **Összegzés**

Komplex gázkromatográfiás és statisztikai vizsgálatokat, növényföldrajzi összefüggéseket feltáró elemzéseket hajtottunk végre, jelentős propolisz adatbázist hoztunk létre.

**PETROVICS NOÉMI**

*npetrovics@hotmail.hu*

Vegyész

MSc, 4. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Eke Zsuzsanna*

*egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

*Nyiri Zoltán*

*PhD hallgató, ELTE TTK*

---

### **Kekszen lévő policiklusos aromás szénhidrogének meghatározására alkalmas folyadék-folyadék extrakciós módszer fejlesztése**

*Kulcsszavak: policiklusos aromás szénhidrogén; GC-MS; keksz; dimetil-szulfoxid*

A policiklusos aromás szénhidrogének (PAH-ok) genotoxikus és karcinogén vegyületek. A humán expozíció legfőbb forrása a táplálkozás, amiben a gabonaalapú élelmiszereknek – így a kekszeknek is – nagy részük van. A gabonanövények olajos magvaiban a PAH-ok képesek akkumulálódni, és mennyiségük a magvak kezelése (pl. szárítása) során tovább nőhet. A kekszek sütése során pirosintézissel további PAH-ok keletkezhetnek. Összességében ezen termékek nem tartalmaznak nagy mennyiségben PAH-okat, de napi szinten sokat fogyasztunk belőlük. Ez indokolja az élelmiszerek PAH-tartalmának felső határértékére vonatkozó szigorú szabályozásokat, melyeket a 835/2011/EU számú rendelet tartalmaz.

Az alacsony határérték indokoltá teszi a PAH-okra nézve szelektív minta-előkészítési módszer fejlesztését. Az élelmiszermintákkal való munka során legnagyobb problémát azok zsírsav és triglicerid tartalma okozza. Egyrészt lipofilitási tulajdonságaik nagyon hasonlóak a PAH-okéhoz, így nehéz a kétféle vegyület elválasztása. Másrészt a kromatográfiás rendszert hosszú távon el tudják szennyezni, amivel a műszer élettartamának csökkenése mellett a célkomponensek minőségi és mennyiségi meghatározását is tönkre tudják tenni.

Az élelmiszer minták zsírméntesítésének céljából a szakirodalomban változatos tisztítási módszereket találhatunk, mint például a LLE, VRK, SPE, MSPD, SFE, ASE, GPC és HS-SPME. Ezekre a soklépéses minta-előkészítési módszerekre jellemző, hogy nagy az oldószer- és időigényük (LLE+VRK/SPE/GPC), valamilyen speciális műszer kell hozzájuk (ASE), vagy a PAH-ok közül csak néhány mérésére alkalmasak (HS-SPME).

Céлом volt egy olyan minta-előkészítési módszer fejlesztése, ami nem igényel sok vegyszert vagy speciális eszközöket, ezért egy dimetil-szulfidos folyadék-folyadék extrakciós módszert dolgoztam ki. A módszer azon a jelenségen alapul, hogy a DMSO kénatomja és az aromás vegyületek  $\pi$ -elektronrendszere közt kölcsönhatás tud létrejönni, ami lehetővé teszi a PAH-ok szelektív extrakcióját, míg a szennyező vegyületek az eredeti oldószerben maradnak. A DMSO-hoz vizet adva kölcsönhatása a PAH-okkal gyengíthető, és a célkomponensek tiszta n-hexánba extrahálhatók. A minta szárítás és bepárlás után alkalmas GC-MS-sel való mérésre.

Munkám során az ismertett minta-előkészítési módszer paramétereit optimaltam, és megállapítottam az extrakciós lépések során használt oldószerek ideális arányát. Az optimalt módszer alkalmasnak bizonyult a PAH-ok zsíros szennyezőktől való elválasztására.

**SCHALL ESZTER**

*seszterke@gmail.com*

Biomérnöki

MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Tömösközi Sándor  
egyetemi docens, BME VBK*

---

### **Kísérleti élelmiszermatrixok kialakítása és alkalmazása a gluténtartalom meghatározására alkalmas analitikai módszerek fejlesztésében**

*Kulcsszavak: ELISA; immunanalitika; referencia anyag; hőkezelés; fehérjemódosulás*

Az élelmiszerekben jelen levő egyes gabonafehérjék túlérzékenységi reakciókat válthatnak ki. A betegek számára az egyetlen kezelési lehetőség a reakciót előidéző fehérjék étrendből történő kizárása. Az érintett fogyasztók érdekében elengedhetetlen a megbízható termékek elérhetősége és a megfelelő tájékoztatás. A glutén tartalmú gabonákra vonatkozóan jelölési kötelezettség van érvényben. Ahhoz, hogy a gluténmentességet biztosítani lehessen, megfelelő élelmiszergyártási technológia mellett megfelelő analitikai módszerek is szükségesek. Több eljárás is rendelkezésre áll a gluténtartalom meghatározására, ezek közül a legelterjedtebb az immunkémiai reakción alapuló ELISA módszer. Azonban a módszer alkalmazhatóságát, a kapott eredmények megbízhatóságát számos korlátozó tényező befolyásolja.

A felmerülő problémák egyik részét maga a meghatározandó fehérjék képezik. Ugyanis a glutén heterogén fehérjék komplex keveréke, amelyekre jellemző a genetikai és környezeti változékonyság. Emellett az élelmiszerek feldolgozása során alkalmazott eljárások (pl. hőkezelés) a fehérjeszerkezet módosulását okozhatja, mely változás hatással lehet a fehérjék mintából való extrakciójára vagy akár az immunreakcióra is. A problémakör másik része a módszerből illetve a módszer hiányosságaiból fakad. A kereskedelmi forgalomban kapható egyes ELISA kitek különböző antitesteket használnak fel a glutén meghatározására, ami azt jelenti, hogy különböző fehérjéket illetve epitópokat ismernek fel. Emellett a kitekben alkalmazott extrakciós oldatok is eltérhetnek, így különböző extrakciós hatékonyságot eredményezve. A megfelelő extrakciós oldat megválasztása szintén fontos kérdés, ugyanis az oldatnak képesnek kell lennie kioldani a mintában lévő összes fehérjét natív illetve feldolgozott formában is.

A fent említett problémákkal együtt a mért eredmények megbízhatóságának ellenőrzésének gátat szab a validált módszerek illetve a nemzetközileg elfogadott referencia anyagok hiánya. A kutatómunka fő célkitűzése a kutatócsoport korábbi eredményeinek felhasználásával olyan, gliadin/glutén fehérjét adott mennyiségben tartalmazó kísérleti modellmatrixok –referencia-anyag jelöltek- kialakítása, és ezek alkalmazása a lehetséges analitikai hibaforrások feltárásában, illetve a termék előállítás során lejátszódó, az analitikai eredményt befolyásoló faktorok azonosításában. A kutatómunka eredményei hozzájárulhatnak az analitikai módszerek fejlesztéséhez, teljesítményjellemzőik javításához.

**GÁL ISTVÁN**

*ifjabbgalistvan@gmail.com*

Kémia tanár - Pedagógiai értékelés és mérés

tanára

MA, 8. félév

Eszterházy Károly Főiskola

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Dr. B. Tóth Szabolcs*

*főiskolai adjunktus, EKE TTK*

---

## **Mikotoxinok bomlásának vizsgálata ózon hatására természetes és modell rendszerekben**

*Kulcsszavak: mikotoxin; dezoxinivalenol; zearalenon; ozonizáció; bomlástermék*

### **Összegzés**

A vizsgálatok során a célunk a vizsgált mikotoxin ózonos kezelése (ozonizáció) után keletkező bomlástermékek minőségi meghatározása volt.

A kutatás gyakorlati jelentőségét az adja, hogy napjainkban az élelmiszerbiztonság egyre kiemeltebb területté válik és az analitikai eljárások fejlődésével egyre több kontamináns, veszélyes ágens került kimutatásra. Ezek közül kiemelkednek a penészgombák által termelt mérgek (mikotoxinok), melyek az élelmiszernövényeken megtelepedve ezekkel az anyagokkal beszenyezik a növényt, akár a szántóföldeken, akár a raktári tárolás során. E folyamat megelőzésére az élelmiszernövényeket kezelésnek lehetne alávetni, melyben külső hatás útján bontanánk a mikotoxinokat, hogy azok ne jussanak el a szervezetbe, illetve ott ne fejtsék ki káros hatásukat közvetetten, illetve metabolizációjuk útján.

Jelen esetben az ozonizáció során keletkező bomlástermékek kimutatása azért lenne fontos, mert egyrészt ez utal az eljárás sikerességére is, hiszen bizonyítja azt, hogy bomlás, átalakulás bekövetkezik a kezelés hatására, illetve azt is fontos kimutatni, hogy a keletkező termékek milyen szerkezettel rendelkeznek, hiszen ez meghatározza az emberi szervezetre gyakorolt hatásukat. Tehát nem lenne érdemes még jó hatékonyság mellett sem az ozonizáció, ha ennek következtében még a kiindulási anyagnál is toxikusabb bomlásterméket kapnánk.

A vizsgálatok tervezésénél első lépésben azt kellett meghatározni, hogy milyen eljárással tudunk hatékonyan és tartós módon ózont előállítani. Ehhez egy korábbi kutatás tapasztalatait vettük át elsősorban, melyben ívfényes és germicid lámpás ózon előállítási kísérletek történtek, előbbi módszer nagyobb hatékonysága és tartóssága mellett. Így jelen dolgozatban is elsősorban az ívfényes ózonképzésre alapoztuk a kísérletek elvégzéséhez szükséges ózon tartalmú légkör előállítását, melynek létrejöttét egyszerű kimutatási reakciókkal ellenőriztük, szintén a kutatási előzmények tapasztalataira támaszkodva.

Második lépésben a mintakezelés kidolgozása, a megfelelő kontaktfelületet biztosító mintabeviteli eszköz kialakítása volt a cél. Ennek keretében olyan tényezőkre kellett ügyelni, hogy a minta ne kontaminálódjon, illetve ne keletkezzen veszteség sem.

Harmadik lépésben a bomlástermékek elválasztása a mátrixtól (HPLC), illetve ezek származékképzés után történő további elválasztása (GC) és szerkezetvizsgálati analízisnek (MS) való alávetése történt meg. Végül így jutottunk el adott bomlástermék szerkezetéig.



**LÓNYI FLÓRA**

*flora.lonyi@gmail.com*

Biomérnök

MSc, 10. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Szarka András*

*egyetemi docens, BME VBK*

*Dr. Monori-Kiss Anna*

*egyetemi tanársegéd, SE*

*Dr. Nádasy György*

*egyetemi docens, SE ÁOK*

---

### **Tartós quercetin táplálékkiegészítés mérsékeli a koronária hálózat hipertónia indukálta előnytelen átépülését**

*Kulcsszavak: flavonoid; érhálózat; geometriai; remodeling*

A quercetin gyakori bioflavonoid, melyről laboratóriumunk korábbi kísérletes munkáiban bebizonyította akut értágító hatását koronária arteriolákon, valamint a tartós quercetin táplálékkiegészítés kedvező hatását a kiserek remodelingjére és hálózati tulajdonságaira. Előbbiek indokolják a következő kérdést: tartós quercetin táplálékkiegészítés kísérletes patkány hipertónia modellben képes-e mérsékelni a koronária kiserek hipertóniára jellemző hálózati átrendeződését? Kísérleteink során 180 g-os hím Wistar patkányokat két csoportba osztottunk. Az egyik csoport (HQ, n=8) nyolc héten át ivóvízbe szuszpendált quercetin kezelést (30 mg/ttkg), míg a másik csoport (HK, n=8) tiszta ivóvizet kapott. A kezelés 28. napján ozmotikus minipumpát ültettünk a hát bőre alá, amely angiotenzin II-t adagolt 28 napig 200 ng/perc/ttkg dózisban mindkét csoportban. Az összesen nyolc hét kezelési idő letelte után invazív vérnyomásmérést végeztünk, majd videomikroszkópos feltárással képeket készítettünk a kipreparált és perfundált koronária hálózatról, melyeken kvantitatív analízist végeztünk.

A quercetin kezelés csökkentette a patkányok vérnyomását (HK: 161±7/122±6 Hgmm, HQ: 137±10/110±10 Hgmm). A szegmentális tortuozitás a quercetin kezelés hatására jelentősen csökkent (HK: 1,3±0,2%, HQ: 0,4±0,06%, p<0,01). A hatás leginkább a közepesen (2-8%, HK: 76 szegmens, HQ: 33 szegmens) és súlyosan tortuóz (8% felett, HK: 10 szegmens, HQ: 1 szegmens) szegmensek számának csökkenésében jelentkezett. Megfigyeltük a falvastagság kismértékű növekedését 200 µm feletti belső átmérőknél a quercetinnel kezelt csoportban (p<0,01). A HK csoport hálózataiban megjelentek az extrém nagy átmérők (600-800 µm), míg a HQ csoportban ez elmaradt (p<0,01). A többszörös és komplex elágazások száma a HQ csoportban csökkenő tendenciát mutatott (3,2±0,5 vs. 2,3±0,6, ns.). A hálózat rendezetlenségét jelző hálózati tortuozitás csökkent (HK: 14±0,1%, HQ: 11±0,01%, p=0,01). A hálózati anomáliák, melyek a hipertóniás hálózatokra jellemzőek (szöglettörések, párhuzamos lefutás, „visszacsapó” ágak, keresztezett kicserélési terület, megcsavarodó elágazás) száma a HQ csoportban jelentősen csökkent (HK: 6,8±0,7 db, HQ: 3,6±0,7 db, p<0,01).

Következtetésül megállapítjuk, hogy a kialakult hipertónia jelentősen torzította a koronária kiserek hálózati struktúráját mindkét csoportban, quercetin tartós kezelése azonban szignifikánsan mérsékelheti az előnytelen remodeling folyamatokat.



## **Elméleti kémia I.**



**RÓZSA ZSÓFIA BORBÁLA**

*rzslb79@gmail.com*

Környezettudomány

MSc, 3. félév

Miskolci Egyetem

Műszaki Anyagtudományi Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Szőri Milán*

*egyetemi docens, ME MAK*

*Dr. Rágyanszki Anita*

*tudományos munkatárs, ME MAK*

---

### **A C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> kémiai tér: a szingulett C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> izomerek szerkezeti és termokémiai tulajdonságainak jellemzése**

*Kulcsszavak: Kémiai Tér; új izomerek; termokémia; képződéshő; termodinamikai térkép*

Dolgozatom célja, a C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> összegképlethez tartozó összes lehetséges konstitúciós (szerkezeti) izomer feltérképezése és termokémiai jellemzése elméleti kémiai módszerekkel. Ehhez először elő kell állítani az összes olyan C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> molekulát, amely eltér akár az atomok kapcsolódási sorrendjében, vagy a kémiai kötések elrendeződésében, beleértve a molekuláris komplexeket is. Természetesen, a szerkezeti izomerek nem csak geometriájukban térnek el egymástól, hanem különféle fizikai és kémiai tulajdonságokkal is rendelkeznek, melyek megváltoztatják termokémiai tulajdonságaikat, energiatartalmukat, és biokémiai szerepüket.

Munkám során, első lépésként gráfelmélet segítségével létrehoztam az C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> összegképlethez tartozó összes lehetséges mono-, bi-, tri- és tetramolekuláris komplexet. Elméleti kémiai módszerek segítségével ellenőriztem a kapott 366 lehetséges szerkezet létezését, majd meghatároztam a létező molekulák molekuláris sajátságait. Ennek érdekében az izomerek geometriáját B3LYP/6-31G(d) elméleti szinten határoztam meg, majd a szerkezetekhez tartozó termodinamikai sajátságokat G3MP2B3 kompozit modellel jellemeztem. A kompozit modell pontosságának megállapításához, a kapott G3MP2B3 képződés hőket összehasonlítottam a rendelkezésemre álló irodalmi értékekkel. A kémiai részecskéket a kapott termokémiai tulajdonságaik alapján termodinamikai térképen ábrázoltam, mely segítségével bármely több molekulából álló rendszer egészében jól átláthatóvá válik, és a szerkezetek termodinamikai stabilitása jól jellemezhető lesz.

Dolgozatom során bemutatom, hogy kémiai gráfelmélet segítségével egy hatékony módszer építhető fel egy adott sztöchiometria feltérképezésére, ahol az atomok adják a gráfok csúcsait, és a köztük lévő kötések a gráf éleit. A módszer általános, a kémiai tér további sztöchiometriai tartományaira kiterjeszthető. Ezáltal több molekulából álló rendszereket nem csak a molekulák egyenkénti vizsgálatával lehet jellemezni, hanem képesek lehetünk teljes molekuláris családokat leírni, illetve egyszerűbbé válhat egy adott tulajdonságkészlettel rendelkező molekula megtervezése. Gyorsan és hatékonyan nyerhetünk információt ezek tulajdonságairól, mint a funkciós csoportonkénti elkülönülésekről, az extrém esetekről, illetve az eddig ismeretlen molekulákról és azok tulajdonságairól. Összességében betekintést nyerhetünk egy adott molekuláris rendszer sokszínűségébe és becslést tehetünk későbbi felhasználhatóságának lehetőségeibe.

**SIMKÓ IRÉN**

*simkoiren@freemail.hu*

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Császár Attila*

*egyetemi tanár, ELTE TTK*

*Furtenbacher Tibor*

*tudományos munkatárs, ELTE TTK*

---

### **A nagyfelbontású molekulaszpektroszkópiától a termokémiáig**

*Kulcsszavak: nehézvíz; partíciós függvény; ideális gáz termokémiai függvények; Laplace-transzformáció; rezgési-forgási energiaszintek*

A nehézvíz termokémiai tulajdonságainak ismerete nagyon fontos sok tudományos és műszaki területen, pl. az atomenergia iparban. Ezen alkalmazások megkövetelik a nehézvízre vonatkozó adatok ismeretét egy rendkívül széles hőmérsékleti tartományban, nagyjából 0 és 6000 K között. 2012-ben az IAPWS egy olyan programot indított el, mely új nemzetközi állapotegyenlet fejlesztését tűzte ki célul a nehézvízre. A standard állapotegyenlet meghatározásához ismerni kell az ideális gáz termokémiai függvényeit, hogy ki lehessen számítani a reális rendszer tulajdonságait, pl. a hőkapacitást, az entalpiát és az entrópiát. Az IAPWS által megfogalmazott követelmény, hogy a 0-6000 K intervallum minél nagyobb részén az ideális gáz hőkapacitás adatok legalább 0,01 % pontossággal kerüljenek kiszámításra.

TDK munkám során a három nehézvíz izotopológ ( $D_2^{16}O$ ,  $D_2^{17}O$  és  $D_2^{18}O$ ) esetén tettem kísérletet arra, hogy minden eddiginél pontosabb hőmérsékletfüggő partíciós függvényt és termokémiai adatokat állítsak elő, és megbecsüljem ezek bizonytalanságát is [1]. A számításokhoz nagyfelbontású spektroszkópiai mérésekből rendelkezésre álló „kísérleti” és nagy pontosságú kvantumkémiai számítások eredményeként keletkező kötött rezgési-forgási energiaszinteket használtam fel. Többféle eljárást vizsgáltam, melyeket a pontos termokémiai függvények meghatározására lehet alkalmazni, teszt rendszernek a  $H_2^{16}O$  molekulát használtam. A partíciós függvény kiszámítására legjobbnak talált eljárás rendkívül munka és erőforrás igényes. Így vizsgáltam olyan közelítő módszereket, melyek a pontos ideális gáz termokémiai függvények meghatározásakor megkívánt kutatási erőfeszítést jelentősen csökkenthetik. Vizsgáltam a partíciós függvény és a számított termokémiai függvények bizonytalanságát is. A hiba két fő forrásának az energiaszintek bizonytalansága és a nemkötő állapotok járuléka adódott. Tanulmányoztam a szomszédos rezgési-forgási energiaszintek távolságának eloszlását. Erre azért kerítettem sort, mert így információt szerezhethünk a molekuláris rendszer dinamikai viselkedéséről.

Összefoglalva, munkám során megkísértem az IAPWS követelményének megfelelő (0,01 %-os pontosságú) termokémiai függvények meghatározását a nehézvíz izotopológjaira. Mindhárom izotopológ esetén 1800 K-ig tartható a megkívánt pontosság.

[1] Simkó, I., Furtenbacher, T., Hruba, J., Zobov, N. F., Polyansky, O. L., Tennyson J., Gamache, R. R., Szidarovszky, T., Dénes, N., Császár A. G., J. Phys. Chem. Ref. Data, beküldés alatt, (2017)

**SARKADI ZSÓFIA**

*sarkadi.zsofia@gmail.com*

Kémia

BSc, 5. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Kristóf Tamás*

*egyetemi docens, PE MK*

*Ható Zoltán*

*tanszéki mérnök, PE MK*

---

### **Kaolinit primer interkalálószerekkel kialakított komplexeinek klasszikus molekuláris szimulációs vizsgálata**

*Kulcsszavak: rétegszilikát; interkaláció; molekuláris dinamika; szerkezetelemzés*

A kaolinit első lépcsős, spontán interkalációjában gyakran alkalmazott interkalálószerrek kisméretű szerves molekulák, melyek nagy dipólusmomentummal rendelkeznek. Munkám során karbamid, formamid és dimetil-szulfoxid kaolinitrétegek közé történő beépülését modelleztem molekuláris dinamikai szimulációkkal.

A kaolinit, a karbamid, a formamid és a dimetil-szulfoxid atomi kölcsönhatási modelljeit korábbi kutatások eredményei alapján választottam, a szimulációkat pedig a GROMACS programcsomag segítségével végeztem. A szimulációk során a kaolinit rétegek közti terének az egyes interkalálószerrekkel kialakított különböző betöltöttségeihez számítottam ki a rétegtávolságokat. A lehetséges interkalációs komplexekre legjellemzőbb rétegtávolságok meghatározása mellett vizsgáltam a komplexeket felépítő vendégmolekulák elhelyezkedését/orientációját leíró eloszlásfüggvényeket, és a szimulációs eredményekből jellemző intermolekuláris kölcsönhatási energiákat számoltam.

**KOVÁCS TAMÁS**

*kovacs.tamas.box@gmail.com*

Vegyésmérnök

BSc, 7. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

**PAPP SZILVESZTER**

*papp.szilveszter44@gmail.com*

Vegyésmérnök

BSc, 5. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Kristóf Tamás*

*egyetemi docens, PE MK*

---

## **Metán-hidrogén gázelegy membránszeparációjának vizsgálata molekuláris szimulációkkal**

*Kulcsszavak: membrántranszport; szelektivitás; zeolitmembrán; permeációs arány*

Atomi szintű tulajdonságokkal leírt anyagi rendszerek viselkedése klasszikus molekuláris szimulációkkal vizsgálható. Napjainkban, a kristályos membránokban és adszorbensekben lejátszódó folyamatok jellemzésében is fontos szerepet töltenek be ezek a szimulációk. Az adszorbensek vizsgálatára elsősorban egyensúlyi adszorpciós szimulációkat alkalmaznak, de ma egyre inkább előtérbe kerülnek a membránokon keresztül végbemenő transzport molekuláris szimulációs számításai is.

Zeolitmembránokon keresztül lejátszódó stacionárius anyagtranszport direkt szimulációját újszerű, speciális nemegyensúlyi molekuláris dinamikai számításokkal végeztük  $\text{CH}_4$  és  $\text{H}_2$  gázok használatával. Az alkalmazott zeolitmembránok tiszta szilíciumos membránok voltak (MFI, LTA és DDR típusúak).

A gázmolekulákra vonatkozó intermolekuláris potenciálmodelleket a szakirodalomból vettük. A zeolitmembránok atomi kölcsönhatási paramétereit (Si és O) azonosnak választottuk, de a membránok a valódi (MFI-, LTA-, vagy DDR-) kristálystruktúrának megfelelő szerkezettel rendelkeztek. Az alkalmazott paraméterek realisztikus voltát egyensúlyi adszorpciós számításokkal ellenőriztük, összehasonlítva a számított eredményeket kísérleti adszorpciós izotermák adataival. A 25°C és 125°C hőmérsékleten, illetve 2,5 és 5 vagy 10 bar nyomáson végzett transzportszimulációk eredményei azt mutatták, hogy a metánra vonatkozó permeációs szelektivitások többnyire eltérnek a tiszta komponensek permeabilitási arányaitól, és jelentősen különböznek az egyensúlyi elegyadszorpciós szelektivitásoktól. Metánra nézve kedvező transzportszelektivitást csak egy esetben tapasztaltunk. A különböző típusú szelektivitási adatok közötti jelentős eltérés részben a gázkomponensek különböző membránbeli mozgékonyságának, ezek betöltöttségtől való függésének és a gázmolekulák eltérő adszorpciós hajlamának tulajdonítható.



**MÁDAI ESZTER**

*esztermadai@gmail.com*

Vegyésszmérnöki

BSc, 5. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Valiskó Mónika*

*egyetemi docens, PE MK*

*Dr. Boda Dezső*

*egyetemi tanár, PE MK*

---

### **Nanoszenzorok modellezése: az érzékenységet befolyásoló paraméterek vizsgálata**

*Kulcsszavak: nanopórus; NP+LEMC; szenzor; szelektivitás; kalibrációs görbe*

A nanopórusok esetében megkülönböztethetünk természetes (pl. ioncsatornák) és mesterséges (pl. szén nanocső ill. műanyag fóliába maratott) nanopórusokat. A mesterséges pórusok hossza a mikrométer, sugara viszont már a nanométer tartományába esik. Két lényeges tulajdonságuk az egyenirányítás és a szelektivitás, ezért egyenirányító diódákként vagy szenzorokként is használhatóak. Munkám során egy nanopórus szenzorként való alkalmazhatóságát vizsgáltam: a póruson belül kötőhelyeket helyeztem el, amelyek a pórusban lévő elektrolitban található detektálandó molekulákra nézve szelektívek. A megkötődésük miatt a mérhető ionáram csökken, így kalibrációs görbék felvételével az áram csökkenéséből meg lehet határozni a detektálandó molekula koncentrációját.

A munkám elméleti jellegű, a membránt, a pórust és az elektrolitot is modelleztük. A henger alakú pórus falára negatív töltést helyeztünk, ezzel a pórust kationszelektívvé tettük. A rendszerben lévő elektrolitra a Primitív Modellt alkalmaztuk, amely az ionokat töltéssel rendelkező merev gömbökként kezeli, míg az oldószert (vizet) egy dielektromos közegként tekinti. Az így létrejövő rendszert a Lokális Egyensúlyi Monte Carlo módszerrel vizsgáltuk, amely jól alkalmazható nem egyensúlyi rendszerekénél. A különböző ionáramokat a Nernst-Planck egyenlettel számoltuk. Ez a modell és a módszertan alkalmas arra, hogy kis koncentrációkat vizsgáljunk, ami azért fontos, mert a detektálandó komponens általában nagyon kicsi koncentrációban van jelen. A dolgozat elsődleges eredményei a pórus különböző paramétereinek (kötőhely erőssége, nagysága, száma; háttérelktrolit anyagi minősége) változtatásával készített kalibrációs görbék megalkotása, illetve a különböző paraméterek hatásának vizsgálata az eszköz érzékenységre. A számolt koncentráció- és potenciálprofilokon keresztül jól megfigyelhetőek a rendszer molekuláris mechanizmusai.

## GANYECZ ÁDÁM

*ganyecz.adam@mail.bme.hu*

Vegyészmérnöki mesterképzési szak, nappali MSc

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Csontos József*

*tudományos főmunkatárs, BME VBK*

---

### Pontos termokémiai számítások fluorozott etilgyökökre

*Kulcsszavak: elméleti kémia, termokémia, fluorozott etilgyökök, csatolt klaszter*

Az 1990-es évek óta a fluorozott szénhidrogéneket széles körben használják hűtőközegként, habosítószerként és hajtógázként az ózonkárosító klórozott származékok helyettesítőjeként. Azonban ezeknek az anyagoknak nagy az élettartamuk és jelentős mértékben hozzájárulnak az üvegházhatáshoz. Ezen molekulák termodinamikai adatainak pontos ismerete – többek között – szükséges ahhoz, hogy az úgynevezett légköri modellek minél megbízhatóbb előrejelzést szolgáltatassanak a Föld éghajlatának alakulásáról. Munkám során a fluorozott etilgyököket vizsgáltam, ezenbelül is a  $\text{CH}_3\text{-CHF}$ ,  $\text{CH}_2\text{F-CH}_2$ ,  $\text{CHF}_2\text{-CH}_2$  és  $\text{CH}_3\text{-CF}_2$  molekulákat.

A számításokhoz csatolt-klaszter (CC) módszereket használtam. A geometriát CCSD(T) módszerrel cc-pVQZ báziskészlettel határoztam meg. A teljes energia kiszámításához a különböző járulékok additivitását feltételeztem a következő egyenlet alapján:

$E_{\text{TOT}} = E^{\infty}_{\text{HF}} + \Delta E^{\infty}_{\text{CCSD(T)}} + \Delta E_{\text{CCSDT}} + \Delta E_{\text{CCSDT(Q)}} + \Delta E^{\infty}_{\text{mag}} + \Delta E_{\text{ZPE}} + \Delta E_{\text{DBOC}} + \Delta E_{\text{Rel}}$ . Az első tag ( $E^{\infty}_{\text{HF}}$ ) a teljes bázisra extrapolált Hartree-Fock energia, amit aug-cc-pCVXZ ( $X=\text{T,Q,5}$ ) bázisokon számolt eredményekből kaptam.  $\Delta E^{\infty}_{\text{CCSD(T)}}$  a teljes bázisra extrapolált CCSD(T) energia, amit aug-cc-pCVXZ ( $X=\text{Q,5}$ ) bázissal kapott eredményekből határoztam meg.  $\Delta E_{\text{CCSDT}}$  és  $\Delta E_{\text{CCSDT(Q)}}$  jelöli a CCSDT és CCSDT(Q) járulékokat, amiket cc-pVTZ, illetve cc-pVDZ bázisokon számoltam.  $\Delta E^{\infty}_{\text{mag}}$  a mag korrelációs járulék, amit az összes elektronnal számolt és a fagyott mag közelítéssel számolt CCSD(T) energiák különbségeként definiálhatunk. Ez is teljes bázisra lett extrapolálva a cc-pCVTZ és cc-pCVQZ bázisokon kapott eredményekből. A zérusponti rezgési energiát ( $\Delta E_{\text{ZPE}}$ ) harmonikus oszcillátor közelítést alkalmazva CCSD(T) módszerrel cc-pVQZ bázissal határoztam meg.  $\Delta E_{\text{DBOC}}$  a diagonális Born-Oppenheimer korrekció, amit CCSD módszerrel cc-pCVTZ bázissal vizsgáltam.  $\Delta E_{\text{rel}}$  pedig a skalár relativisztikus hatások járuléka. Ezenkívül vizsgáltam a molekulák forgási és inverziós potenciális energiafelületét CCSD(T)/pVTZ szinten.

A kapott képződéshőket összevetve a korábbi adatokkal megállapítható, hogy minden esetben jól egyezik az eddigi értékekkel, és a  $\text{CH}_2\text{F-CH}_2$  molekulát kivéve, mindegyik esetben az általam számolt érték a legpontosabb.

**KELEMEN ÁDÁM ANDRÁS**  
*adamandras.kelemen@gmail.com*  
Fizika  
BSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem  
Természettudományi Kar

*Témavezetők:*  
*Jákli Imre*  
*tudományos munkatárs, MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport*  
*Csizmadia Imre*  
*egyetemi tanár, ELTE TTK*

---

### **Semleges, protonált és deprotonált peptid kötés transz->cisz izomerizációja**

*Kulcsszavak: fehérje; szabadentalpia; kvantumkémia; amid; DFT*

Az N-metil acetamid segítségével tanulmányoztuk a peptidkötés transz >cisz izomerizációját. Ehhez a következő öt esetet vizsgáltuk: amikor az amidkötés oxigénje van protonálva, egyszer a nitrogénhez közel, máskor a nitrogéntől távoli pozícióban, valamint a deprotonált és protonált nitrogén esetét.

A semleges molekula izomerizációjának B3LYP/6-311++G(d,p) elméleti szinten meghatározott átmeneti állapotának Gibbs potenciálja 85,1 kJ/mol volt. A karbonil oxigénjének savas protonálása a gátmagasságot  $150 \pm 4$  kJ/mol fölé emelte, mert a nitrogén magános elektronpárja erősebben konjugálódott a karbonilcsoporttal. A peptidkötés deprotonálása a nitrogénen 105 kJ/mol fölé emelte az átmeneti állapot Gibbs potenciálját, mivel itt is erősödött a konjugáció. Ezekkel ellentétben a peptidkötés nitrogén atomjának protonálása lecsökkentette a gátmagasságot 12,4 kJ/mol-ra. Ennek alapján ezzel a mechanizmussal történhet legnagyobb valószínűséggel a peptidkötés transz >cisz izomerizációja.

**BLANÁR ESZTER**

*blanareszter91@gmail.com*

Vegyész

MSc, 4. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezető:*

*Leitgeb Balázs*

*tudományos munkatárs, Szegedi Biológiai Kutatóközpont*

---

### **Tigerinin peptidek szerkezetvizsgálata elméleti módszerekkel**

*Kulcsszavak: antimikrobiális peptid; molekuladinamika; turn struktúra; intramolekuláris H-kötés; oldallánc rotamer*

A *Rana tigerina* béka bőrváladékából izolált tigerininek 11-12 aminosavból álló ciklikus peptidek, amelyek széles-spektrumú antimikrobiális hatással jellemezhetők. A tigerinin peptidek, illetve ezek sztereoizomerei esetén egy átfogó konformáció-analízist, valamint összehasonlító térszerkezeti jellemzést végeztünk el elméleti módszerek alkalmazásával. A másodlagos szerkezeti elemek vizsgálata során különböző típusú béta-turn és gamma-turn struktúrák előfordulását tanulmányoztuk a tigerininek összes lehetséges tetrapeptid, illetve tripeptid szakaszára vonatkozóan. Ezek az eredmények azt mutatták, hogy a peptidek sztereoizomereinek adott tetrapeptid szakaszai esetén megjelentek az I és III típusú béta-turn-ök, míg adott tripeptid szakaszok esetében inverz gamma-turn-öket azonosítottunk. Továbbá meghatároztuk azokat a karakterisztikus intramolekuláris H-kötéseket ( $i \leftarrow i+3$  és  $i \leftarrow i+2$  H-kötések), amelyek fontos szerepet játszanak a fent említett béta-turn és inverz gamma-turn struktúrák stabilizálásában. Az eredmények alapján megállapítható, hogy a különféle másodlagos szerkezeti elemek előfordulásával összhangban vannak a kialakuló intramolekuláris H-kötések. Mindemellet az aminosavak oldalláncai esetében meghatároztuk a preferált rotamer állapotokat is. A tigerinin peptidek sztereoizomerei esetén összehasonlítottuk a különböző térszerkezeti tulajdonságokat, és az eredmények az alábbi megfigyelésekre vezettek. Egyrészt a különféle sztereoizomerek jellegzetes konformációs sajátosságokkal rendelkeznek, másrészt pedig nemcsak különbségek, hanem hasonlóságok is megfigyelhetők a sztereoizomer peptidek háromdimenziós térszerkezetét illetően.

## **Elméleti kémia II.**



**MARGÓCSY ÁDÁM**

*margocsyadam@gmail.com*

Vegyész

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Dr. Szabados Ágnes*

*egyetemi docens, ELTE TTK*

---

### **Az általánosított Wick-tétel alkalmazása egy geminál alapú CCD-módszer fejlesztésében**

*Kulcsszavak: többdeterminánsos módszerek; elektronkorreláció; normálrendezés; ring közelítés; spinmentes formalizmus*

Jelen dolgozatban egy több determinánsból álló referenciafüggvényen alapuló, úgynevezett multireferencia (MR) korrelációs módszer fejlesztésének néhány lépését mutatjuk be. Az egy determinánsból kiinduló (single-reference: SR) módszerek jellemzően rossz eredményt adnak, ha egyensúlytól távoli geometriájú molekulák leírására próbáljuk őket alkalmazni. Emiatt annyira szükséges a MR alapú korrelációs módszerek fejlesztése.

Vizsgálatainkat egy egyszerű MR hullámfüggvényen, a kételektron egységekből felépülő APSG hullámfüggvényen végezzük. Az elmélet kiindulópontja egy korábban javasolt MR Coupled-Cluster (CC) formalizmus[1].

Az elméleti háttér ismertetése után saját munkánkat mutatom be. Ez röviden a SR Coupled-Cluster Doubles (CCD) módszerben alkalmazott úgynevezett ring közelítés általánosítása MR esetre. A MR formalizmusban -- a kezelendő tagok nagy száma miatt -- a levezetések papíron már nem végezhetők el. Az egyenletek levezetésére ezért egy programot írtam Python nyelven. A program rövid bemutatása után jövőbeni terveinket ismertetem, amelyek: a program numerikus tesztelése és az eredmények összevetése egy rokon MR módszerrel, az APSG alapú random fázis közelítéssel (random phase approximation, RPA).

[1] B. Bandyopadhyay, D. Mukherjee, U. S. Mahapatra, B. Datta: State-Specific Multi-Reference Coupled Cluster Formulations: Two Paradigms (Adv. Quant. Chem.; 30: 163-193; 1998)

**FÖLDVÁRI DOMINIC**

*foldvaridominic@gmail.com*

Kémia

BSc, 7. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Dr. Szabados Ágnes*

*egyetemi docens, ELTE TTK*

---

## **Az Unrestricted Hartree-Fock egyenletek megoldása lokalizált pályákból kiindulva**

*Kulcsszavak: kezdőpályák; iteráció; geminálók; párosított pályák*

A dolgozatban arra törekszünk, hogy az ún. Unrestricted Hartree-Fock (UHF) egyenletek megoldásához alkalmas kezdőpályákat generáljunk olyan esetekben, amikor az UHF globális minimum megkeresése problémás. Ezt szem előtt tartva először megismerkedünk a geminál alapú hullámfüggvények tulajdonságaival, majd azokat felhasználva kvantitatív összefüggéseket vezetünk le. Belátjuk, hogy az UHF hullámfüggvény erősen ortogonális kételektron függvény egységekből áll, így más geminál alapú hullámfüggvénnyel is kapcsolatba hozható. Az ún. APSG (Antisymmetrized Product of Strongly Orthogonal Geminals) és az UHF módszerek között sűrűségmátrixok és hullámfüggvények azonosításával is tudunk összefüggést teremteni. A drága APSG pályaoptimálást elhagyva ezek az összefüggések alkalmasak arra, hogy az UHF egyenletek iterációs megoldásához kezdőpályákat generáljunk. A módszer az általunk választott kanonikus vagy lokalizált RHF(Restricted Hartree-Fock) pályák UHF kezdőpályákká való forgatásához keresi meg a szükséges koefficienseket. Ezeket a választott pályapárokból felépített geminál lokális Schrödinger-egyenletének megoldásából kapjuk meg. Az eddigiekben vizsgált molekulák ugyan nem tekinthetők igazán bonyolult eseteknek, mégis megfelelő kezdőértékek nélkül az iterációs eljárások nem feltétlenül vezetnek sikerre. Az eredményeinkről elmondhatjuk, hogy a konvergenciát minden esetben kevés lépésben értük el. Továbbá, azokban az esetekben, amikor az irodalomban több UHF megoldást publikáltak, a különböző energiájú minimumokat mi is megtaláltuk. Távolsági célként megfogalmazhatjuk, hogy a módszert bonyolultabb esetekre is szeretnénk alkalmazni, ahol a geminál alterek kiválasztása nem teljesen egyértelmű.



**PUSKÁS JÁNOS**

*j.puskas92@gmail.com*

Vegyésszmérnök

MSc, 1. félév

Pannon Egyetem

Mérnök Kar

*Témavezető:*

*Dr. Egedy Attila*

*tudományos munkatárs, PE MK*

---

### **Dinamikus szimulátorok fejlesztése emulációs OTS rendszerhez**

*Kulcsszavak: OTS; dinamikus szimulátor; izopropil-alkohol*

A vegyiparban és számos más iparágban egyre nagyobb mértékben alkalmazzák a folyamat szimulátorokat, mely sokoldalú felhasználásuknak köszönhető. Ezek olyan modell-bázisú számítógépes programok, melyek alkalmasak egy technológia tervezésére, fejlesztésére, analízisére, valamint optimalizálási feladatok elvégzésére.

A vegyipari technológiák biztonságos üzemeltetéséhez képzett szakemberekre van szükség, akik kellő tapasztalattal rendelkeznek. Ezek a folyamat szimulátorok segítséget nyújthatnak a kívánt tudás elsajátításához. Az operátor tréning szimulátorok (röv. OTS) olyan szoftverek, melyek használatával az operátorokat üzemi szimulációk során lehet betanítani, illetve felkészíteni a technológia irányítására, valamint a felmerülő problémák hatékony kezelésére. Az ilyen programok kezelőfelülete hasonló az üzemben használtéval, de itt ez a technológia helyett a folyamat szimulátorral van kapcsolatban. A szimulációs gyakorlatok során így az operátorok kellő tapasztalatra tehetnek szert, hogy a technológiát hatékonyan és biztonságosan üzemeltethessék.

Munkám során egy olyan izopropil-alkoholt előállító üzem dinamikus szimulátorának megalkotása a célom, mely alkalmas OTS rendszer megalkotására. A 2-propanol egy petrokémiai alapanyagból előállított, széleskörűen alkalmazott oldó- és tisztítószer. Korábbi munkám során a Honeywell UniSim Design programjának segítségével felépítettem egy fiktív üzemet, annak stacionárius szimulátorának megalkotásával, továbbá optimalizáltam a berendezéseket, valamint meghatároztam a felmerülő beruházási és üzemeltetési költségeket. Ezek alapján megalkottam a reakciós rendszerig az üzem dinamikus szimulátorát, és vizsgáltam az üzemindítási folyamatokat. Jelen munkám során célom a dinamikus szimulátor megalkotása és vizsgálata a technológiára a szeparációs alrendszerig.

**GÓGER SZABOLCS**

szgoger@gmail.com

Vegyész

BSc, 5. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Lendvay György*

*egyetemi tanár, PE MK*

---

### **Hidrogén-bromid és hidroxilgyök reakciójának dinamikai vizsgálata**

*Kulcsszavak: kváziklasszikus trajektóriamódszer; elemi reakció; reakciókinetika; reakciódinamika; molekuláris ütközések*

A brómtartalmú vegyületek légkörkéimiai átalakulásában fontos szerepe van a  $\text{HBr} + \text{OH} \rightarrow \text{Br} + \text{H}_2\text{O}$  reakciónak. Emiatt a brómvegyületek légköri sorsának leírására alkalmas légköri modellek felállításához szükséges ismerni ennek kinetikai és termodinamikai paramétereit. A reakció különleges tulajdonsága, hogy egyrészt a reakcióúton található potenciálgát a reaktánsok energiaszintje alatt van, másrészt a reaktánsok közt komplexképződésre is számíthatunk. Az ilyen reakciók kinetikai és dinamikai tulajdonságairól szerzett ismereteink még hiányosak, így a reakció jellemzése tudományos szempontból érdekes eredményekkel kecsegtet. Dolgozatom címadó reakciójának dinamikáját kváziklasszikus trajektóriamódszerrel vizsgálom. A módszer lényege, hogy a klasszikus mozgásegyenleteket megoldva igen nagyszámú egyedi trajektória menetét követjük időben. Az ütközések kezdeti paramétereit Monte Carlo módszerrel választjuk, és kimenetelük ismeretében átlagos mennyiségeket, reakcióvalószínűséget, hatáskeresztmetszeteket és sebességi együtthatókat származtatunk. A reaktánsok kvantumállapotait szemiklasszikus módszerrel szimuláljuk. A módszer alkalmazásához szükséges, hogy ismerjük a reakció teljes potenciálisenergia-felületét, melyet az irodalomból vettem [1]. Célom, hogy a hidrogén-bromid hidroxilgyökkel szemben mutatott reakciójának reakciódinamikai vizsgálata során fényt derítsek több, a folyamat részletes jellemzése szempontjából jelentős hatásra. Megmutatom egyrészt, hogy a reakció-hatáskeresztmetszet értéke kis ütközési energiáknál hatalmas, ennek növelésekor először gyorsan csökken, majd egy minimumon áthaladva növekedni kezd. A reaktánsok enyhe forgási gerjesztése csökkenti a reakció valószínűségét, a forgási energia további növelése viszont újra növekedést eredményez. Főleg ennek a két jelenségnek tulajdonítom, hogy a reakciósebességnek a hőmérséklet függvényében 600 K környékén minimuma van. Bemutatom azokat az eredményeket, amelyek arra utalnak, hogy egyrészt a reakcióra vezető komplex viselkedése nem statisztikus, másrészt a potenciálisenergia-felület nyeregponja nem tekinthető átmeneti állapottnak. E két tulajdonság miatt arra számíthatunk, hogy a konvencionális átmenetiállapot-elmélet e reakció leírására nem használható.

[1] de Oliveria-Filho, A. et al. J. Phys. Chem. Lett., 2014, 5, 706–712.

**FODOR ANGÉLA**

*angif6@freemail.hu*

Kémia

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Purgel Mihály*

*tudományos munkatárs, DE TTK*

*Fehér Péter Pál*

*PhD hallgató, DE TTK*

---

### **Hidrogéntárolás mechanizmus-vizsgálata $[\text{IrH}_2(\text{emim})(\text{PPh}_3)_2]$ katalizálta reakcióban**

*Kulcsszavak: elméleti kémia; elméleti számítások; irídium komplex; reakcióút vonal*

A munka során egy feltételezett mechanizmust vizsgáltam kvantumkémiai számításokkal. A vizsgált reakció a formiát-ion-hidrogénkarbonát-ion és hidrogén gáz egyensúlyi reakciója, melyet egy irídium komplex katalizál. A komplexben két trifenil-foszfín és egy karbén ligandum található. Az általam fontosnak tartott elemi lépéseket vizsgáltam: a komplexbe koordinált hidrogén molekula deprotonálódását és a formiát-ion képződését. Eredményei alapján a koordinált hidrogén molekula deprotonálódása volt a sebességmeghatározó lépés.

**BALOGH ÁLEX KÁLMÁN**

*balogh.alex@yahoo.com*

Kémia

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Purgel Mihály*

*tudományos munkatárs, DE TTK*

*Fehér Péter Pál*

*PhD hallgató, DE TTK*

---

### **Hidrogéntárolás mechanizmus-vizsgálata [RuH<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>3</sub>] katalizálta folyamatban**

*Kulcsszavak: elméleti kémia; elméleti számítások; ruténium komplex; reakcióutak*

A munkám során egy hidrogén tárolására alkalmas rendszer mechanizmusát vizsgáltam kvantumkémiai számításokkal. Az általam vizsgált rendszer a formiát-ion-hidrogén-karbonát és hidrogén gáz ruténium komplex által katalizált egyensúlyi reakció. A komplexben található három trifenilfoszfin, két hidrid és az adott elemi lépés liganduma. A mechanizmus főbb lépéseit feltérképeztem, így meghatároztam a sebességmeghatározó lépést és feltételeztem több lehetséges reakcióutat. Eredményeim részben megegyeztek az elméleti előzmények kísérleti eredményeivel.

**GYŐRI TIBOR**

*tiborgyri@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezető:*

*Czakó Gábor*

*egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

---

### **Implicit szolvatációs számítások a $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{F}^-$ $\text{S}_\text{N}2$ reakcióra**

*Kulcsszavak: PCM; SCRF; SMD; IRC; DFT*

A bimolekuláris nukleofil szubsztitúciós ( $\text{S}_\text{N}2$ ) reakciók gyakoriak a laboratóriumban és a természetben egyaránt. Ilyen reakcióra az egyik legegyszerűbb példa a metil-klorid és a fluoridion reakciója. Munkám céljai a Gaussian09 programban implementált implicit oldószermodellek teljesítőképességének a felmérése, különböző elektronszerkezet-számító módszerekkel és báziskészletekkel, a szolvatáció hatásának vizsgálata a rendszer stacionárius pontjainak környezetében, és IRC (Intrinsic Reaction Coordinate) számítások elvégzése különböző oldószerekben.

A reaktánsokra és a szubsztitúciós termékekre végzett számítások alapján a legjobban az SMD (Solvation Model based on Density) teljesít, azonban az ionok szolvatációját még ez is alulbecsüli. Az elektronszerkezet-számító módszerek hasonlóan teljesítenek, csak a HF (Hartree-Fock) tér el jelentősen a többitől.

A B3LYP sűrűségfunkcionál kissé anomális eredményeket ad, és nagy távolságoknál hibás szolvatációs energiákat adhat. Az MP2 (másodrendű Møller-Plesset perturbáció), illetve az M05-2X és M06-2X sűrűségfunkcionálok hasonlóan jól teljesítettek. A HF módszer jelentősen eltérő szolvatációs energia lefutást ad.

A báziskészlet növelése nem feltétlenül eredményez pontosabb szolvatációt, és a nagy távolságú kölcsönhatások leírásához szükséges diffúz bázisfüggvények hozzáadása ronthat a szolvatációs energia pontosságán. Ezek alapján egy szolvatált számítás tervezésekor a használt sűrűségfunkcionál szabadon választható más szempontok alapján, de a báziskészlet kiválasztása a szolvatációs energiára gyakorolt hatás miatt fokozott körültekintést igényel.

A stacionárius pontok geometriája a laza kötések megnyúlását mutatja. Vizes oldatban a számított reakció-szabadentalpiaváltozás 8,6 kcal/mol-lal túlságosan negatív, túlnyomórészt a fluoridion szolvatációjának alulbecslése miatt. Az eredmények alapján a  $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{F}^-$  reakció esetében még a legjobb szolvatációs modell is csak kvalitatív pontosságot nyújt. A fluoridion extrém mértékű szolvatációját figyelembe véve, valószínűsíthető, hogy más nukleofilek esetében a szolvatációs modellek hibája is kisebb lenne, azonban a vizsgált reakció szemlélteti, hogy bizonyos esetekben a szolvatációs modell hibája nagyobb vagy összemérhető is lehet az elektronszerkezet módszerből és számítás többi közelítéséből fakadó hibákkal.

**SZENTIRMAI VERONIKA**  
*szentirmaiveronika@gmail.com*  
Biológia  
BSc, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem  
Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*  
*Jedlovsky Pál*  
*egyetemi tanár, EKE TTK*  
*Szőri Milán*  
*egyetemi docens, ME MAK*

---

### **Metil-amin jégfelületen történő adszorpciójának vizsgálata nagykanonikus Monte Carlo szimulációval**

*Kulcsszavak: kémiai evolúció, metil-amin, adszorpció*

Az előző század folyamán, számos Földön és űrben végzett megfigyelés alapján igazolódott, hogy az univerzum egészében jelen vannak jégreszecskek, vékony réteget képezve számos csillagközi objektumon. A jég felülete alkalmas a csillagközi régiók molekuláinak adszorbeálására és így színtere lehet számos kémiai folyamatnak. A jégfelületek a kémiai evolúció egyik fontos állomásánál, az aminosavak keletkezésénél is fontos szerepet játszhattak, hiszen kísérleti tény, hogy a jégfelületen adszorbeált metil-amin és szén-dioxid, UV fény hatására metil-ammónium-metil-karbamát ( $\text{CH}_3\text{NH}_3+\text{CH}_3\text{NHCOO}-$ ) intermediereken keresztül glicinné alakul akár a csillagközi térnek megfelelő extrém körülmények között is. E tekintetben a metil-amin molekula ( $\text{CH}_3\text{NH}_2$ ) jégfelületen történő feldúsulása kitüntetett szereppel rendelkezik a legegyszerűbb aminosav, a glicin keletkezésében. Ennek leírására ezidáig nem született tanulmány, ezért dolgozatom célja a hiányzó energetikai és strukturális jellemzés bemutatása.

Munkánk során a metil-amin jégfelületen történő adszorpciójának energetikai és strukturális vizsgálatát végeztük el nagykanonikus Monte Carlo szimulációval. Összesen 41 szimulációt végeztünk el a kémiai potenciál szisztematikus változtatása mellett, és meghatároztuk a metil-amin adszorpciós izotermáját. Az izotermán megfigyelhető plató a metil-amin molekulák stabil monorétegét mutatja. Az energetikai vizsgálatok alapján az adszorpció hajtóereje nem kizárólag a felülettel való hidrogénhidas kölcsönhatás kialakítása, igen jelentős a laterális dipólus-dipólus hozzájárulás is. A metil-amin molekulák felületi adszorpciója már egészen kis kémiai potenciál/relatív gőznyomás értékek mellett is termodinamikailag kedvezményezett folyamat, ami a molekulák felületi feldúsulását eredményezi. Az orientációs vizsgálatok megmutatták, hogy alacsony felületi borítottság mellett olyan orientációjú molekulák vannak nagyobb arányban jelen, melyek rendelkeznek egy gázfázis felé mutató szabad hidrogén atommal, és így vélhetőleg hatékonyan képesek kémiai reakcióba lépni más molekulákkal, például szén-dioxiddal.

Eredményeink a várakozásnak megfelelően igazolták a metil-amin jégfelületen mutatott erős adszorpciós képességét. Mindez egybecseng azokkal a megfigyelésekkel, melyek szerint a metil-amin molekulák jégfelületen képesek kémiai reakcióba lépni más molekulákkal.

**ORBÁN BALÁZS**

*bborban@me.com*

Vegyésmérnöki szak

BSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Szilvási Tibor*

*egyetemi tanársegéd, BME VBK*

---

### **Szililén-komplexek szintonként való alkalmazhatóságának elméleti vizsgálata**

*Kulcsszavak: szintonkémia; kvantumkémia; transzfer; addíció; szililén*

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék több évtizedes hagyománnyal rendelkezik a szénecsoport divalens vegyületeinek elméleti tárgyalásának és kvantumkémiai vizsgálatának területén. Munkám témakörének középpontjában a 2006-ban Driess és munkatársai által előállított szililén áll. A vegyület érdekessége, hogy az első olyan vegyület, amelyben a divalens szilíciumatom hattagú gyűrűbe van foglalva. Elektronszerkezete különleges, mivel a gyűrű hét  $\pi$ -elektront tartalmaz, amelyben nem alakul ki delokalizált elektronrendszer.

A szililének nemkötő elektronpárjuknak köszönhetően kiváló donáló képességgel rendelkeznek, így számos, szintén reaktív csoportot sikerült stabilizálni, mint például a legegyszerűbb foszfinidént (:PH). Kísérleti eredményekkel megmutatták, hogy ezen csoportokat transzferálni lehet más szerves vegyületekre, így szintonként alkalmazhatók különböző reakciókban. Munkám során hat analóg szililén-komplex stabilitását és szintonként való alkalmazásuk lehetőségét tanulmányoztam, amelynek legfontosabb szempontja a transzfer reakciók lejátszhatósága. Emellett megvizsgáltam egy másik lehetséges reakciótípust, az addíciót, amely melléreakcióként léphet fel a transzfer folyamatok kísérleti megvalósítása során. A reakciók eredményeinek értelmezéséhez nélkülözhetetlen a szililén és a hozzá kapcsolódó csoport közötti kötés vizsgálata, így erre több módszert is alkalmaztam kutatásom során.

A szililén-komplexek szintonként való alkalmazhatósága még kiforratlan kutatási területe a kémiának, azonban nagyon is ígéretesnek mutatkozik, mivel az ilyen reaktív csoportok (pl. foszfinidén) szintézis ekvivalensének megtalálása a mai napig megoldatlan probléma. Az általam vizsgált hat szililén-komplexből három alkalmasnak tűnik erre a szerepre.





## **Fizikai kémia**



**PARRAGH DÁVID MÁTÉ**

david.parragh@gmail.com

Anyagmérnöki

BSc, 3. félév

Miskolci Egyetem

Műszaki Anyagtudományi Kar

*Témavezető:*

*Némethné Dr. Sóvágó Judit*

*egyetemi docens, ME MAK*

---

## **A para-toluol-szulfonsavval katalizált n-butil-alkohol és ecetsav reakciójának optimalizálása mikroreaktorban**

*Kulcsszavak: folyamatos-áramlásos kémia; mikroreaktor; szerves szintézis; reakció-optimalizálás*

Az iparilag előállított szervessav-észterek elsősorban a vegyipar területén, főként oldószerként kerülnek felhasználásra, melyeknek az alacsony toxicitású n-butil-acetát előszeretettel alkalmazott képviselőjük. Előállítási technológiája ipari környezetben általában szakaszos reaktorban, vagy desztillációs reaktorban, laboratóriumban pedig refluxáltatás útján valósul meg, amely eljárások anyag- és energiaigényesek, valamint alacsony hozamot biztosítanak. Az átfolyó cellás mikroreaktor egy gazdaságosabb alternatívát nyújt a n-butil-acetát szintézisére. A mikroreaktorban a fokozott hő- és anyagtranszportnak, illetve a gyorsan és precízen szabályozható működési paramétereknek köszönhetően a hagyományosan elvégzett reakciókhoz képest hatékonyabb előállítási reakciók valósíthatók meg. További vonzó tulajdonsága, hogy a laboratóriumban optimalizált reakciók könnyen emelhetők ipari léptékvé, hiszen a termelés a mikroreaktorok esetében moduláris rendszerben valósulhat meg.

A kutatómunka célja a reakció konverziójának kvantitatív jellemzése és a mikroreaktor működési paramétereinek optimalizálása az adott reakcióra nézve, ezzel megalapozva a későbbi léptéknövelést. Az egyensúlyi, acilezéses észterképződési reakció kulcs paraméterét; a termodinamikai egyensúlyi állandóját a különböző beállítású mérések során kiszámoltam, valamint ennek hőmérsékletfüggéséből a reakcióentalpiát is meghatároztam. A reakció optimális körülményeit 1:1, sztöchiometriai butanol:ecetsav arány, 353,15 K reaktorhőmérséklet, 5 perces tartózkodási idő és butanolban oldott, 1,75 g para-toluol-szulfonsav monohidrát katalizátor mennyiség esetében tapasztaltam, melynél az egyensúlyi állandó értékére 23,44, a nyers reakcióelegy n-butil-acetát tömegszázalékára pedig 58,62% adódott, a reakcióhő értékére +142,2 kJ/mol-t kaptam.

A mikroreaktorban vizsgált reakciót para-toluol-szulfonsav monohidráttal katalizáltam, és az eredményeket összevetettem a kénsavval katalizált reakció hozamaival. A mérésorozat bizonyította, hogy a környezetvédelmi és korróziós szempontból előnyösebb p-TsOHm a kénsav hatékonyságát jól megközelítve, feltételezhetően a kénsavéhoz hasonló mechanizmussal katalizálja a reakciót. Összhangban a szakirodalmi adatok alapján vártakkal, a mérési eredményeim is alátámasztották, hogy a mikroreaktorban lejátszódó egyensúlyi észterképződési reakció nagymértékben eltolható a termékképződés irányába, melynek a para-toluol-szulfonsav monohidrát alkalmas katalizátora mikroreaktorban is.

**BAKÓCZY ANDRÁS**

*bakoczyandras@gmail.com*

Vegyésszmérnök

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:*

*Dr. Nagy Miklós*

*egyetemi adjunktus, DE TTK*

---

### **Az 1-N-metilamino-5-izocianonaftalin, mint potenciális sejtfesték**

*Kulcsszavak: fluoreszcencia; szolvatokróm; sejtfesték*

A modern orvosi és biológia vizsgálatok rendkívül fontos részét képezik a képalkotó eljárások. Mint ilyen, a fluoreszcens mikroszkópia segítséget nyújthat a sejtek, sejtalkotók, szövetek, és biomolekulák szerkezetének tanulmányozásában, valamint jól vizsgálhatók az ezek közötti kölcsönhatások is. Ehhez azonban vitális, specifikus festékanyagokra van szükség.

A munkám során egy új, az Alkalmazott Kémiai Tanszéken kifejlesztett festékanyagot a 1-N-metilamino-5-izocianonaftalint (monoMICAN-t) vizsgáltam. Ennek érdekében UV- Vis és fluoreszcenciás méréseket végeztünk. A vizsgálatok alapján igazolódott az anyag pozitív szolvatokróm hatása, miszerint növekvő oldószer polaritás mellett az emissziós sávok batokróm (vörös irányú) eltolódást szenvednek. A vegyület szolvatokróm viselkedését három különböző elmélet (Lippert-Mataga, Kamlet-Taft, Catalán) alapján igyekeztünk modellezni. A Kamlet-Taft és a Catalán elmélet is megfelelően bizonyult az oldószer és a fluorofor közötti kapcsolat matematikai leírására. Ezen felül, megvizsgáltuk a fluoreszcencia piridinnel történő kvencselődését és magyarázatot adtunk a jelenségre.

A munkánk során meghatároztuk a monoMICAN optikai tulajdonságait, valamint bemutattuk, hogy mely matematikai modellel írhatjuk le effektíven a vegyület szolvatokróm viselkedését. A biológiai vizsgálatokat a Debreceni Egyetem Biotechnológiai és Mikrobiológiai Tanszékével közösen megkezdjük. Eredményeink szerint több sejt vonal is jól tolerálja az új festékmolekulát és jelentős fluoreszcenciát mutat mikroszkóp alatt. A kötődési helyek beazonosítása folyamatban van.

**KOLAROVSZKI ZOLTÁN**

*ifj.kolarovszki@gmail.com*

Vegyésszmérnök

BSc, 6. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Mika László Tamás*

*egyetemi docens, BME VBK*

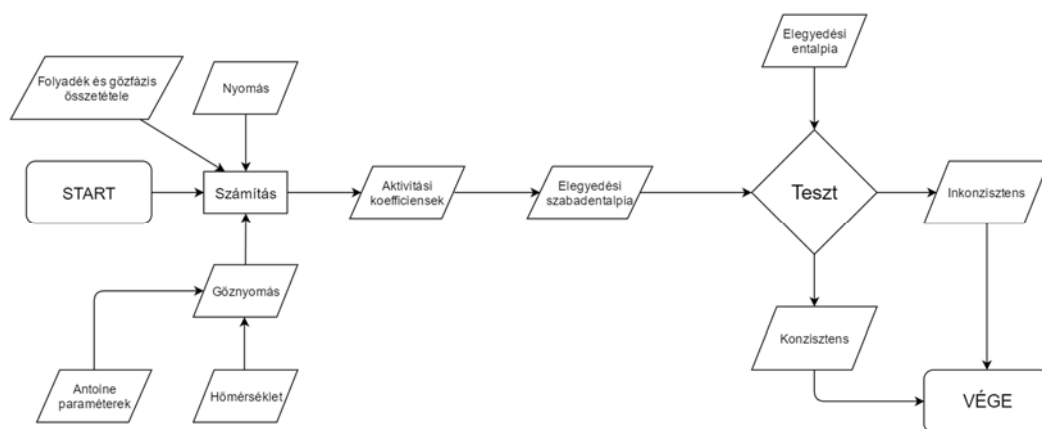
*Havasi Dávid*

*egyetemi tanársegéd, BME VBK*

## **Gőz-folyadék egyensúlyi adatok konzisztenciájának vizsgálata egy új módszerrel**

*Kulcsszavak: termodinamika; monte-carlo; szimuláció; statisztika; teszt*

Folyadékkelegyek desztillációs szeparációjához elengedhetetlenül fontos a megfelelő tervezés, mivel igen nagy az energiaigényük. A megfelelő tervezéshez szükség van a rendszert alkotó komponensek, elegyek termodinamikai tulajdonságainak ismeretére, mint például a gőz-folyadék egyensúlyi adatokra. Ezen a területen továbbra is kiemelten fontos az adatok mérési úton történő meghatározása, mivel sok esetben számításos módszerrel nem modellezhető megfelelően az adott rendszer. A mérési adatokat viszont szükséges megvizsgálni, hogy azok összhangban vannak-e a megfelelő termodinamikai törvényszerűségekkel, amelyekre hőtani összefüggésekből származtatható ún. termodinamikai konzisztenciateszteket alkalmaznak. Ezen tesztek azonban különböző elhanyagolásokat tartalmaznak, és használhatóságuk esetenként korlátozott, pl. nagy forráspontkülönbségű biner elegyek esetében.



1. ábra. A Kojima-féle pont-teszt elvégzéséhez szükséges mennyiségek és kapcsolatok.

Munkám célja nagy forráspontkülönbségű elegyekre is alkalmazható konzisztenciateszt kidolgozása, amelyhez az irodalomban rendelkezésre álló adatok mellett egy saját kísérletsorozattal meghatározott gőz-folyadék egyensúlyi adatsort is felhasználtam.

**JÁNK NÓRA ANNA**

*nora.jank@gmail.com*

Kémia

BSc, 7. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Láng Győző*

*egyetemi tanár, ELTE TTK*

*Zsélyné Ujvári Mária*

*egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

---

### **Kompozit polimerfilm-elektrodok vizsgálata**

*Kulcsszavak: vezető; kapacitás; voltammetria; impedancia; tárolás*

Munkám során az egyik legígéretesebb vezető polimerből, a PEDOT-ból készítettem kompozitot. A PEDOT filmet arany hordozóra 0,01 M EDOT monomert és 0,1 M Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> – oldatot tartalmazó elektrolitból galvanosztatikusan választottam le 0,2 mA/cm<sup>2</sup>-es áramsűrűséggel, 1000 s ideig. Az elkészült film elektrokémiai viselkedését ciklikus voltammetriával és elektrokémiai impedancia-spektroszkópiával tanulmányoztam 0,1 M-os Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> – oldatban, a 0,1 – 0,6 V potenciáltartományban (SSCE referencia elektródhoz képest).

A kompozit készítésekor először 300 s időtartamig -0,3 V pontenciálon redukáltam a filmet, majd 100 s-ig a kálium-permanganátra nézve 0,005 M-os oldatba mártottam. A fent említett elektrokémiai vizsgálatokat a kompoziton is elvégeztem a készítés utáni napon. A felvett spektrumokon egyértelműen látszik, hogy a kapacitás a tiszta filmhez képest egy nagyságrendnyit nőtt. Az impedancia spektrumokon szembejövően hosszú Warburg-szakaszt fedezhetünk fel, amely a diffúziós folyamatok meghatározó jelenlétének eredménye. A tárolási mód hatásának vizsgálatára két közeget választottam:

a.) Millipore ioncserélt vízben áztattam a kompozit filmet 48 illetve 120 órán keresztül. A közeghatásának vizsgálatát szintén CV és EIS módszerével végeztem. 48 óra után a kompozit film degradációját tapasztaltuk, de a változás kevésbé volt meghatározó. Azonban 120 órás kiázás után a kompozit gyakorlatilag tökéletesen degradálódott, a voltammogramokon és impedancia spektrumokon láthatjuk, hogy a kezdeti PEDOT filmmel közel egyező kapacitást nyertünk 120 óra eltelte után.

b.) 0,1 M Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> – oldatban áztattam a kompozit filmet 48 illetve 120 órán keresztül. A felvett voltammogramokon és impedancia spektrumokon látható, hogy már a 48 órás tárolás során is kisebb mértékű a degradáció, mint a Millipore vízben való áztatáskor, a kapacitások értékei minimálisan változtak. A 120 órás tárolás eredménye nem tökéletesen reprezentatív, mert a spektrumok alapján arra következtethetünk, hogy a PEDOT oxidációja is végbement.

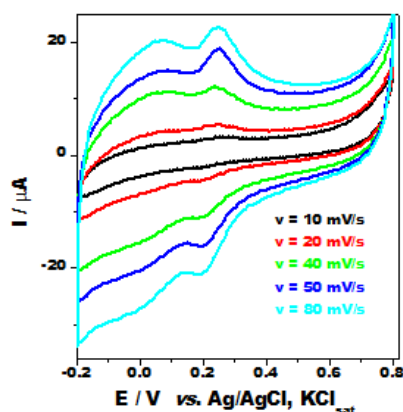
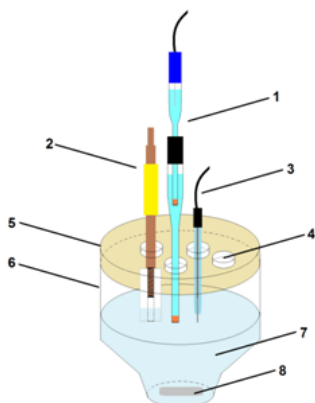
Következtetések: A tárolási közegnek csak kis mértékben van meghatározó szerepe. A 48 órás tárolás során célszerű 0,1 M-os Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> – oldatban áztatni a kompozit filmet. A 120 órás tárolás után kapott mérési eredmények alapján a mindkét közegben tapasztalt drasztikus kapacitáscsökkenés miatt gyanítható, hogy valójában a kompozit áztatásának időfüggését látjuk. A tartós tároláshoz szükséges egy alkalmas módszer kifejlesztése.

### Módosított elektródok dopamin meghatározására

**Kulcsszavak:** kitozán; nafion; redukált grafén-oxid; módosított elektród; dopamin

A dopamin (3, 4-dihydroxyphenylethylamine, DA) egy fontos biomolekula, mely neurotransmitter szerepet lát el az emlősök központi idegrendszerében. A katekolamin fiziológiai szerepe részben az elektrokémiai tulajdonságainak köszönhető, melyek betegségek diagnosztizálásában is jelentősek. Ennek köszönhetően vonzó téma az elektrontranszfer vizsgálata elektrokémiai módszerekkel, melyek számos előnnyel rendelkeznek a konvencionális kromatográfiás módszerekhez képest, elsősorban a valós idejű mérések esetében. A megfelelő szelektivitás és kimutathatósági határok elérése érdekében az elektródok felületét rendszerint enzimek, önrendezett monorétegek, zeolitok és újabban fém nanorészecskék, illetve grafének segítségével módosítják.

A kutatás célja grafén (redukált grafén-oxid - rGO) vagy grafén-oxid (GO) immobilizációja egy üveges szén elektród felületén (GCE). Ehhez egy negatív töltésű (Nafion) vagy egy pozitív töltésű (Kitozán, Chit.) polimert használtunk. Az elkészült módosított elektródokat ciklikus voltammetriával jellemeztük. Az elkészült GCE/GO/Nafion és GCE/Chit/rGO/Chit módosított elektródokat dopamin szelektív meghatározására alkalmaztuk négyszög hullámú voltammetria segítségével. Az elektródok jó analitikai paramétereket mutattak (érzékenység, kimutathatósági határ) az irodalmi adatokhoz képest. Szelektivitás mérések bebizonyították, hogy a GCE/Chit/rGO/Chit módosított elektródok potenciálisan alkalmazhatóak lehetnek dopamin meghatározására biológiai minták esetében. A legjobb tulajdonságokkal rendelkező elektródot dopamin meghatározására alkalmaztuk nem biológiai valós minta esetében. Az elektród által meghatározott koncentráció 99.42%-os pontossággal egyezett a gyártó által szolgáltatott adatokkal.



**BÁRDOS CSANÁD**

*bardoscsanad@gmail.com*

Vegyésszmérnök

MSc, 3. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Boda Dezső*

*egyetemi tanár, PE MK*

*Dr. Valiskó Mónika*

*egyetemi docens, PE MK*

---

### **Nanopórusok falán lévő töltésmintázat hatása a szelektivitásra és egyenirányításra**

*Kulcsszavak: nanopórus; ioncsatorna; egyenirányítás; szimuláció; töltés*

A mesterséges nanopórusok hossza mikrométer, míg átmérője a nanométer tartományba esik. Úgy állítják elő őket hogy nehézfém ionnal bombázzák a műanyag fóliát, majd savas maratással tágítják a pórust. A pórusok belső felületét kémiai módszerekkel elektromosan töltötté tehetik, amivel változatos töltésmintázatokat lehet elérni. A töltés mintázat változtatásával különféle tulajdonságokkal rendelkező nanopórusok álláthatók elő. Ha a pórus falának töltése negatív, akkor a nanopórus a kationokra szelektív, de nem egyenirányít. Ha a töltés az egyik oldalon pozitív, a másikon negatív (a félvezető N-P átmenetek mintájára), akkor a nanopórus egyenirányító diódként viselkedik, de nem szelektív. A dolgozatban azt vizsgálom, hogy hogyan függ a nanopórus egyenirányító illetve szelektivitási tulajdonsága a pórus falán lévő pozitív és negatív töltésű tartományok nagyságától. Munkám elméleti jellegű, ahol a nanopórusra, a membránra és az elektrolitra egyszerű modelleket alkotunk. Az ionokat töltött merev gömbökként kezeljük, az oldószert pedig egy adott relatív permittivitású dielektromos kontínuumként vesszük figyelembe. A nanopórus egy henger, aminek a falán ponttöltéseket helyezek el. A rendszer vizsgálatára a Lokális Egyensúlyi Monte Carlo (LEMC) módszert alkalmaztam, ami lehetővé teszi nem-egyensúlyi rendszerek vizsgálatát. A különböző ionok áramát a Nernst-Planck (NP) transzportegyenlettel számolom. A szimuláció és a transzportegyenlet csatolásával előálló NP + LEMC módszerrel hatékonyan lehet a nanopóruson keresztül folyó iontranszportot tanulmányozni. A számítások elsődleges eredményei az áram-feszültség karakterisztikák, de a koncentráció, kémiai potenciál, és elektromos potenciál profilok tanulmányozásával betekintést nyerhetünk az egyenirányítás és a szelektivitás molekuláris mechanizmusába.



**ZALKA DÓRA**

*zalkadora@caesar.elte.hu*

Vegyész

MSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Láng Győző*

*egyetemi tanár, ELTE TTK*

*Zsélyné Ujvári Mária*

*egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

---

### **Poli(3,4)-etiléndioxitifén elektrokémiai degradációjának vizsgálata módosított elektródokban**

*Kulcsszavak: PEDOT; ciklikus voltammetria; elektrokémiai impedancia spektroszkópia; túloxidáció; elektrokémiai viselkedés*

Tudományos diákköri munkámban a poli(3,4-etiléndioxitifén) (PEDOT) degradációját vizsgáltam módosított elektródokban. A PEDOT vezető polimer széles körben kerül felhasználásra, emiatt a polimer stabilitásának ismerete fontos szempont. A PEDOT filmeket 0,01 M EDOT-ot és 0,1 M Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-ot tartalmazó elektrolitoldatból, galvanosztikus körülmények között választottam le az arany hordozókra. Az elektrokémiai és korróziós viselkedést ciklikus voltammetria és elektrokémiai impedancia spektroszkópia segítségével vizsgáltam. Egy nappal a leválasztás után ciklikus voltammogramokat vettem fel 50, 100, 10 és 10 mV·s<sup>-1</sup> pásztázási sebességgel -0,1 – 0,6 V (KCl-dal telített kalomel elektróddal szemben) közötti potenciáltartományban. Ezután a potenciáltartomány felső határát 1,5 V-ra növeltem, aminek következtében a voltammogramokon egy anódos oxidációs csúcs megjelenését figyeltem meg, amelyhez nem tartozott redukciós csúcs. Az impedancia spektroszkópiás mérések azt mutatták, hogy az eredeti állapothoz képest a túloxidált film kapacitása lecsökken, viszont a töltésátlépési ellenállás növekszik. Ez arra utal, hogy a túloxidáció miatt a film elektrokémiai aktivitása csökken és a töltésátlépési folyamat a fém/polimerfilm határfelületen gátoltabbá válik a frissen előállított filmekéhez viszonyítva. Ezt a jelenséget eltérő kísérleti körülmények között is tanulmányoztam. Néhány óra elteltével a töltésátlépési ellenállás a szubsztrát / film határfelületen lecsökkent és újra az eredetihez hasonló, kapacitív viselkedés volt megfigyelhető. Ez alapján elmondható, hogy ez egy nemstacionárius, időben változó rendszer. Mivel az impedancia spektroszkópiában az egyes frekvenciák megmérése időhöz kötött, ezért nem lehetséges minden időpillanatban nyomon követni a polimer állapotát. A túloxidáció időpillanatára Z. Stojnov köbös spline interpolációs módszerével sikerült egy „virtuális” impedancia spektrumot konstruálni, amellyel meghatározható volt a kezdeti töltésátlépési ellenállás. Végül dolgozatomban a PEDOT / MnO<sub>2</sub> kompozit elektródot is tanulmányoztam, mely a jövő ígéretes témájának tűnik.

**SZEKERES KRISZTINA**

*szekkriszt@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Zsélyné Dr. Ujvári Mária*  
*egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

*Láng Győző*  
*egyetemi tanár, ELTE TTK*

---

### **Poli(3,4-etiléndioxítiofén)-filmek elektrokémiai tulajdonságainak vizsgálata**

*Kulcsszavak: PEDOT; CV; EIS; pH-függés; túloxidáció*

Tudományos diákköri munkám során az ELTE-TTK Elektrokémiai és Elektroanalitikai Laboratóriumban a poli(3,4-etiléndioxítiofén) vezető polimer tulajdonságainak vizsgálatába kapcsolódtam be. A PEDOT széles körben alkalmazott polimer, ennek köszönhető, hogy a vele foglalkozó tudományos közlemények száma tízezres nagyságrendű. A PEDOT filmeket jellemző néhány alapvető elektrokémiai tulajdonság meghatározásának eddig kevés figyelmet szenteltek. Munkám során az elektrolitoldat pH-jának, valamint az ellenionoknak a filmre gyakorolt hatását, továbbá a PEDOT-filmben oxidáció során végbemenő szerkezeti változásokat vizsgáltam. A méréseket  $4\text{ cm}^2$  felületű arany hordozóra galvanosztatikusan leválasztott, viszonylag vastag (kb.  $3\text{ }\mu\text{m}$ ) polimerfilmeken végeztem.

- A minták viselkedését különböző elektrolitoldatokban (0,2 M HClO<sub>4</sub>; 0,1 M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>; 0,2 M HClO<sub>4</sub> : 0,2 M NaClO<sub>4</sub>=1:1; 0,2 M HClO<sub>4</sub> : 0,2 M NaClO<sub>4</sub>=1:4; 0,2 M NaClO<sub>4</sub>; 0,1 M Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) ciklikus voltammetria és elektrokémiai impedancia spektroszkópia módszerével vizsgáltam. A ciklikus voltammogramok kapacitív jelleget mutattak, az áram nagysága a polarizációs sebességgel növekedett. Az impedanciaspektrumokban nagy frekvenciákon a töltésátvételi folyamatra jellemző, kis átmérőjű félkörív, közepes frekvenciákon egy rövid, ún. „Warburg-szakaszt” figyeltem meg. A kisfrekvenciás rész alapvetően kapacitív viselkedést mutatott. A különböző közegekben felvett spektrumokat összehasonlítva jól megfigyelhető volt, hogy a használt elektrolitoldatok fajlagos vezetése eltérő.
- A PEDOT-film 0,8 V vs. SSCE potenciál pozitívabb elektródpotenciál értékeken irreverzibilisen oxidálódik. Kísérleteim során tanulmányoztam az oxidációnak a film szerkezetére gyakorolt hatását. Ciklikus voltammetriás görbék felvétele után a polimer szerkezetének változását pásztázó elektronmikroszkóppal, röntgendiffrakcióval és elektrokémiai impedancia spektroszkópiával vizsgáltuk. Megfigyeléseink alapján az eredetileg kompakt, és a hordozóhoz erősen tapadó PEDOT-film a túloxidáció során jelentős szerkezeti átalakuláson megy keresztül. Kevesebb ciklussal, illetve kevésbé pozitív potenciálhatárig oxidálva a filmet jellegzetes árkok alakulnak ki; több cikluson keresztül, illetve pozitívabb potenciálhatárig történő oxidáció során az árkok összefüggő hálózattá fejlődnek. A röntgendiffrakciós eredmények szerint a PEDOT-film kezdetben amorf szerkezete „kristályosabbá” válik. A szerkezeti változások során kialakuló új tulajdonságok új típusú alkalmazásokat tesznek lehetővé.

## **Kémiai technológia I.**



**KÖRÖSI MÁRTON**

*mkorosi13@gmail.com*

Vegyésszmérnöki Mesterképzési Szak

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Székely Edit*

*egyetemi docens, BME VBK*

---

#### **4-Klórmandulasav resolválása gáz-antiszolvens kristályosítási technika alkalmazásával**

*Kulcsszavak: szuperkritikus; szén-dioxid; enantiomer; mikrokristályok; fázisegyensúly*

Enantiomertiszta vegyületek előállítását a vegyipar számos ágazata igényli, mivel az egyes enantiomerek élettani hatása erősen eltérő lehet. Gyakran kedvezőbb a sztereoszelektív szintézis helyett az optikailag aktív vegyületet resolválással előállítani. Erre kínálnak lehetőséget a diasztereomer sóképzésen alapuló elválasztások, ezen belül is innovatív lehetőségként a szuperkritikus közegben végzett kristályosítás. A szén-dioxid oldószerként, vagy kicsapószerként történő alkalmazása a szerves oldószerek használatát csökkenti, illetve új módszerek kidolgozására ad lehetőséget.

TDK munkám során a számos szerves kémiai szintézis intermediereként, valamint resolválószerként is használt 4-klórmandulasav az irodalomban eddig nem ismert antiszolvens diasztereomer sóképzésen alapuló resolválását dolgoztam ki. A resolválószerként használt (R)-1-feniletánamint félekvivalens mennyiségben adagoltam. A diasztereomer sót a reakciókomponensek metanolos oldatából, szén-dioxid hozzáadásával, gáz antiszolvens technikával kristályosítottam, majd az elreagálatlan, oldatban maradó sav-enantiomert és a szerves oldószert szén-dioxidos extrakcióval távolítottam el az autoklávból.

Fázisegyensúlyi méréseket végeztem a resolválási kísérletek során alkalmazható bemérési koncentrációk feltérképezésére, ezután látóüveges autoklávban figyeltem meg a kristályképződést. A szén-dioxid hozzáadása után a kristálykiválás azonnal megkezdődik, és a kristálynövekedéssel együtt folytatódik az egy órás keverési idő alatt.

Részletesen vizsgáltam a nyomás, a hőmérséklet és a szén-dioxid – metanol tömegarány hatását a resolválásra. 160 bar nyomáson, 40 °C hőmérsékleten, 7,5-es oldószerarány mellett a raffinátumként nyert (R)-(R) só enantiomertisztasága (ee) egy lépésben meghaladta a 70%-ot, 70%-os termelés mellett. A nyomás (120–200 bar tartományban) és a hőmérséklet (35–55 °C tartományban) csak kismértékben befolyásolja a resolválás hatékonyságát, legnagyobb szerepe az oldószeraránynak van. Az enantiomerkeverék átkristályosítással továbbtisztítható, egy második resolválási lépésben 90% enantiomertisztaságot értem el.

A kristályos diasztereomer só képződését a raffinátumokban röntgen-pordiffrakciós elemzéssel igazoltam. A raffinátumok kristályszerkezete az enantiomertisztaságtól függetlenül megegyezett. Ennek ellenére a pásztázó elektronmikroszkópiával megvizsgált mintákban a kristályok formája és mérete egymástól jelentősen eltért a kristályosításnál alkalmazott paraméterek hatására.

**DOMOKOS ANDRÁS**

*domokos.andras0618@gmail.com*

Gyógyszervegyész-mérnöki Szak

MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Balogh Attila*

*tudományos segédmunkatárs, BME VBK*

*Dr. Nagy Zsombor Kristóf*

*egyetemi adjunktus, BME VBK*

*Dr. Marosi György*

*egyetemi tanár, BME VBK*

*Dr. Rapi Zsolt*

*tudományos munkatárs, BME VBK*

---

### **Acetilszalicilsav teljesen folyamatos szintézise és formulációja elektrosztatikus szálképzés alkalmazásával**

*Kulcsszavak: folyamatos technológia; elektrosztatikus szálképzés; áramlásos kémia*

A legtöbb nagy iparág az utóbbi évtizedekben a folyamatos gyártásra rendezkedett be, míg a gyógyszeripar továbbra is szakaszos alapon működik. Habár ily módon költségesebb és lassabb a gyártás, valamint a termék minősége is ingadozhat, a szigorú hatósági szabályozás gátat szab a szemléletváltásnak. A folyamatos rendszerekben kialakuló állandósult állapot valós idejű követésével, és azonnali visszacsatolással a termék minősége állandó értéken tartható, illetve olcsóbb és gyorsabb lesz a gyártás.

A hatóanyagok szintézisének folyamatos áramlásos reaktorokban történő kivitelezésére számos példa található, azonban a szintézissort követő gyógyszerformuláció közvetlen, megszakítás nélküli megvalósítása már nagyobb kihívásnak bizonyult a kutatók számára. A Massachusetts Institute of Technology (MIT) laboratóriumában bemutatott egyetlen ilyen példában a hatóanyag szintézisének és formulációjának összekapcsolását a klasszikus műveletek folyamatosításával érték el, ráadásul a végső feldolgozás a hatóanyag kémiai stabilitása szempontjából előnytelen olvasztásos módszerrel történt [1].

Az elektrosztatikus szálképzés egyedülálló lehetőséget nyújt a szintézis felől érkező hatóanyag-tartalmú folyadékelegy azonnali átalakítására száraz terméké. A folyamat közönséges körülmények között kíméletesen történik, akár az illékonnak nem tekinthető oldószerek is eltávolíthatók a nagyfeszültség hatására húzott mikro- és nanoszálak képződése során. Mindezeket figyelembe véve munkánk célja egy olyan laboratóriumi gyártóberendezés kialakítása volt, mellyel demonstrálható az áramlásos reaktor közvetlen összekapcsolhatósága az elektrosztatikus szálképzéssel. Modellreakcióként az acetilszalicilsav szintézisét választottuk ecetsav-anhidridet alkalmazva reagensként, ahol a melléktermék magas forrpontú ecetsavat szükséges eltávolítani a termék egyidejű formulálásával.

A szalicilsav savkatalizált acilezésének optimálása után a folyamatos reaktorban képződő reakcióelegy feldolgozhatóságát vizsgáltuk elektrosztatikus szálképzéssel. A kapott vízben jól oldódó polimer szálakban a hatóanyag fizikai állapotát differenciális pásztázó kalorimetriával vizsgáltuk. Kapilláris elektroforézis mérésekkel igazolható volt, hogy a szálak ecetsavtartalma a hatósági határérték alatt volt, továbbá a HPLC mérések a forgalmazott készítménnyel közel azonos tisztaságot mutattak.

[1] S. Mascia és társai, *Angew. Chemie*, 2013

**BENKŐ BENCE**

bencebenko@gmail.com

Vegyésmérnöki alapszak

BSc, 6. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Varga Tamás*

*egyetemi docens, PE MK*

---

### **Füstgázból történő piperazin oldattal végzett szén-dioxid kinyerés szimulációs vizsgálata**

*Kulcsszavak: abszorpció, deszorpció, környezetvédelem, modellezés*

A szén-dioxid kibocsátás még ma is jelentős költséget jelent a vegyipari vállalatoknak. Mind gazdasági, mind környezetvédelmi érdek, hogy a lehető legjobban csökkentsük a környezetünkbe kikerülő szén-dioxid mennyiségét. Így amennyiben a tüzelőanyagként felhasznált földgázból, vagy az égés során keletkezett füstgázból a szén-dioxid megfelelő tisztasággal és költségek mellett kinyerhető, a kapott szén-dioxid már széles körben értékes komponensek, pl. szintézisgáz előállítására felhasználható.

A mai ipari környezetben a leggazdaságosabb eljárásokat, technológiai megoldásokat keresik a vállalatok annak érdekében, hogy csökkentsék a szén-dioxid kibocsátás kapcsán a beruházási költséget, illetve annak megtérülési idejét. A mai mérnöki tevékenység egyik legalapvetőbb eszköze a modellezés.

Az elválasztott szén-dioxid átalakítására irányuló törekvések egyre hangsúlyosabbak napjainkban, példaképp az izlandi Carbon Recycling International vállalat a világon elsőként, megújuló energiaforrások felhasználásával állít elő szén-dioxidból metanolt, amelyet később akár biodízel előállítására is fel lehet használni.

Olyan technológia stacioner szimulátorát készítettem el, amelyben kémiai reakcióval kísért abszorpcióval valósítják meg a szén-dioxid kinyerést egy ipari kazán füstgázából. A technológia két fő egységből, egy abszorberből és egy deszorberből áll, melyeknek a főbb méreteit és üzemeltetési paramétereit a munkám során optimalizáltam. Piperazint különböző koncentrációban tartalmazó oldószereket alkalmazva vizsgáltam a kémiai reakcióval kísért abszorpción alapuló technológia fajlagos energiaigényét.

## HAJNAL ÁDÁM

adam.hajnal7@gmail.com

Általános vegyipari és folyamatmérnöki specializáció  
BSc, 6. félév

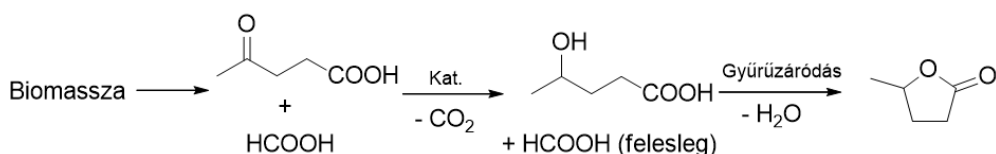
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*  
*Havasi Dávid*  
*egyetemi tanársegéd, BME VBK*  
*Dr. Mika László Tamás*  
*egyetemi docens, BME VBK*

### Hangyasav-gamma-valerolakton gőz-folyadék egyensúlyának vizsgálata

*Kulcsszavak: fázisegyensúly; platform molekulák; szeparáció; termodinamika*

Az elmúlt években számos kutatásban foglalkoztak különféle, úgynevezett platform molekulák előállításával és felhasználásával. Ezek közül nagyon előnyös tulajdonságokkal rendelkezik a gamma-valerolakton (GVL), amely élelmiszeripari, mezőgazdasági és háztartási hulladékokból is előállítható. A GVL egy lehetséges előállítása a levulinsav transzfer hidrogénezése 4-hidroxivaleriánsavvá, ami spontán gyűrűzáródással GVL-ná alakul. A reakcióhoz hidrogénforrásként a biomasszából a levulinsav mellett képződő hangyasav is hasznosítható (1. ábra)



1. ábra: A gamma-valerolakton előállítása a levulinsav transzfer hidrogénezésével

A reakció során feleslegben alkalmazott hidrogéndonor egy része a termékelegyenben marad, így az ekvimoláris mennyiségben képződő GVL és víz mellett hangyasav is jelen van. Az elegy komponenseinek hatékony elválasztására alkalmas lehet egy desztillációs eljárás, melyhez alapvető a rendszert alkotó elegyek termodinamikai adatainak, pl. gőz-folyadék egyensúly ismerete. A komponensek biner elegyei közül a  $\text{H}_2\text{O}$ -GVL<sup>2</sup> és a  $\text{H}_2\text{O}$ -HCOOH elegyek gőz-folyadék egyensúlyi adatait már meghatározták. Kutatómunkám célja a hiányzó HCOOH-GVL elegy gőz-folyadék egyensúlyának teljes koncentrációtartományban történő kísérleti meghatározása és különféle aktivitási koefficiens modellekhez párkölcsönhatási paraméterek kiszámítása. Kísérleteim alapján megállapítható, hogy a GVL-HCOOH rendszer elválasztása során nem kell a desztilláció szempontjából meghatározó azeotróp-képződéssel számolni.

<sup>1</sup>Fábos, V.; Mika, L. T.; Horváth, I. T., Organometallics, 2014, 33, 181.

<sup>2</sup>Havasi, D.; Mizsey, P.; Mika, L. T., J. Chem. Eng. Data, 2016, 61, 1502



LAKÓ ÁGNES

lako.agnes@gmail.com

Vegyésmérnöki

BSc, 6. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:

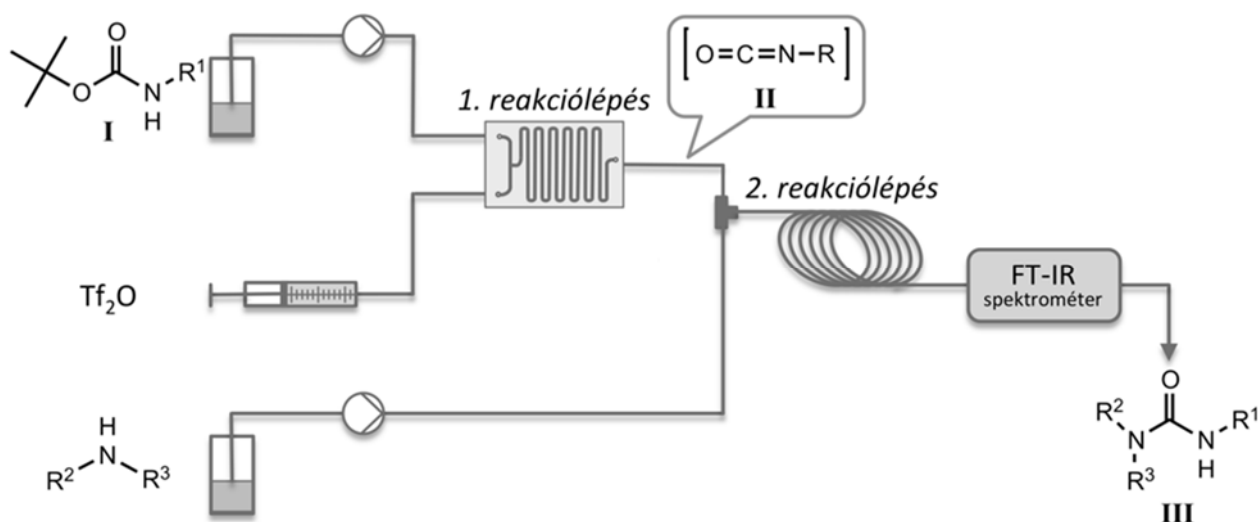
Dr. Greiner István

kutatói igazgató, Richter Gedeon Nyrt.

### Karbamid származékok újszerű szintézise áramlós reaktorban

**Kulcsszavak:** áramlós kémia; karbamidképzés; kapcsolt mikroreaktorok; in-line analízis; gyors optimalizálás

A korszerű, laboratóriumi méretben alkalmazható áramlós kémiai módszerek lehetővé teszik sorba kötött folytonos mikroreaktorok üzemeltetését. Az így kialakított rendszerekben szerves vegyületek többlépéses szintézise valósítható meg.



1.ábra

Szubsztituált karbamidszármazékok újszerű szintézisére nyílik lehetőség közvetlenül a terc-butoxikarbonil védőcsoporttal ellátott aminokból kiindulva. Ezen két lépéses reakció megvalósítására olyan folytonos üzemű rendszert (1. ábra) terveztünk és állítottunk össze, melyben a védett aminból (I) az első reaktorban izocianát köztitermék (II) képződik, melyet izolálálás nélkül egy újabb reaktorban szekunder aminnal reagáltatva a megfelelő karbamidszármazék (III) keletkezik.

Az áramlós rendszerben a szóban forgó átalakítás körülményeit in-line analitikai módszer (FT-IR spektroszkópia) alkalmazásával finomhangoltuk, csökkentettük a nemkívánatos reagensfeleslegeket és javítottuk a termelékenységet a szakaszos eljáráshoz képest. A kifejlesztett módszerrel több gyógyszerkémiai releváns karbamidszármazék szintézisét végeztük el, jó termelésekkel.

**JUHÁSZ KINGA**

*juhasz.kinga92@gmail.com*

Vegyésszmérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Bagi Péter*

*posztdoktor, BME VBK*

*Dr. Keglevich György*

*egyetemi tanár, BME VBK*

---

**P-Sztereogén centrumot tartalmazó foszfin-oxidok alkalmazhatóságának vizsgálata  
enantioszelektív katalitikus Wittig-reakcióban**

*Kulcsszavak: aszimmetrikus; foszforkémia; foszfor-királis; katalizátor; olefin*

A szintetikus szerves kémiában a szén-szén kettőskötés létrehozására az egyik leggyakrabban alkalmazott eljárás a Wittig-reakció, amelynek azonban egyik legnagyobb hátránya, hogy a megfelelő foszfint sztöchiometrikus mennyiségben kell alkalmazni, és így ekvivalens mennyiségben képződik a megfelelő foszfin-oxid melléktermékként. Az elmúlt években O'Brien és munkatársai kidolgozták a Wittig-reakció katalitikus változatát, amelyhez katalitikus mennyiségű foszfint alkalmaztak. A reakció során a reakcióelegyhez feleslegben adott szilán felelős a melléktermékként keletkező foszfin-oxid foszfinná történő folyamatos deoxigénezéséért.

A Wittig-reakció egyik kevésbé ismert változata az aszimmetrikus Wittig-reakció, amely során a megfelelő prokirális karbonil-vegyületből kiindulva ekvivalens mennyiségű királis foszforvegyülettel állítják elő a kívánt optikailag aktív terméket. Az aszimmetrikus Wittig-reakciónak szintén létezik katalitikus változata, azonban az irodalomban eddig kizárólag királis vázat tartalmazó foszfin-oxidokat alkalmaztak pre-katalizátorként.

TDK munkám fő célkitűzése az volt, hogy gyűrűs illetve aciklusos P-sztereogén centrumot tartalmazó foszfin-oxidok alkalmazhatóságát vizsgáljuk aszimmetrikus katalitikus Wittig-reakcióban. Emellett célunk volt annak a feltárása, hogy az alkalmazott foszfin-oxidok szerkezete, illetve a reakciókörülmények hogyan befolyásolják a termelést és az enantioszelektivitást a megfelelő prokirális karbonil-vegyület aszimmetrikus katalitikus Wittig-reakciója során.

**MUDRA ÁGNES KRISZTINA**  
*mudra.agnes.krisztina@gmail.com*  
Vegyésmérnök  
BSc, 7. félév

Pannon Egyetem  
Mérnöki Kar

*Témavezető:  
Dr. Varga Csilla  
egyetemi adjunktus, PE MK*

---

### **Szén nanocső és gumiőrlemény hatásának vizsgálata polietilénben**

*Kulcsszavak: szén nanocső, gumi, polietilén*

Kísérleti munkám során hulladék gumiőrlemény és szén nanocső alkalmazásának hatását tanulmányoztam kereskedelmi forgalomban kapható polietilénben. Összesen 10%-ban alkalmaztam a két töltőanyagot, kezeletlen formában, illetve kompatibilizáló anyagok jelenlétében. A hengerszéken készített, majd préselt minták mechanikai tulajdonságait, ezen belül a húzó-, relaxációs húzó-, valamint ütőszilárdságának változását vizsgáltam. Megállapítottam, hogy a húzójellemzők javítása a szén nanocső és gumiőrlemény együttes alkalmazásával megoldható, az ütőszilárdság, viszont a csak gumiőrlemény tartalmú minta esetében javul. Amennyiben mindkét tulajdonság együttes javítása a cél, kompatibilizáló adalék alkalmazása szükséges. Sikerült olyan olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú adalékot előállítani, amellyel ez a cél is teljesíthető.

**KIS-JAKAB KÁLMÁN**  
*kalman.kisjakab@gmail.com*  
Vegyésszmérnök  
MSc, 1. félév  
Pannon Egyetem  
Mérnöki Kar

*Témavezető:  
Dr. Varga Csilla  
egyetemi adjunktus, PE MK*

---

**Új szerkezetű kopolimer adalékok alkalmazása hulladék PET/HDPE blendekextrúziós  
feldolgozása során**

*Kulcsszavak: PET/HDPE blend; extrúzió; újrahasznosítás; kompatibilizáló adalék*

A polimer blendek kutatási területén nagy kihívást jelent a vegyes műanyagok újrahasznosítása úgy, hogy a tulajdonságok megfelelő szintjét elfogadható költségek mellett lehessen biztosítani. A PET/PO blendek gyakorlati szempontból is jelentős területet képviselnek. Alapvetően ez a blend nem összeférhető komponensekből áll. A kölcsönhatások javítása érdekében számos erőfeszítést tettek, pl: PET módosításával, vagy különböző kompatibilizáló adalékok alkalmazásával. Kísérleti munkám során hulladék PET és HDPE összeférhetőségének javításával foglalkoztam, különböző olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú adalékok alkalmazásával. Az adalékaim hatását kereskedelmi forgalomban kapható adalékkal is összehasonlítottam. A szelektív gyűjtésből származó hulladék alapanyagokat ikercsigás extrúderben homogenizáltam, és különböző formájú (szál, illetve fólia) termékeket állítottam elő. A minták húzó igénybevétellel szembeni ellenálló képességét, valamint reológiai jellemzőit vizsgáltam. Sikerült olyan kompatibilizáló adalékot előállítani, amely meghaladta a kereskedelmi adalék hatékonyságát, több tulajdonság szempontjából is.

## **Kémiai technológia II.**



**TACSI KORNÉLIA**

*kornelia1192@gmail.com*

Vegyésszmérnök BSc. nappali

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Pataki Hajnalka*

*posztdoktor, BME VBK*

*Dr. Marosi György*

*egyetemi tanár, BME VBK*

---

### **ATR-UV/Vis és Raman spektroszkópián alapuló visszacsatolós szabályozás fejlesztése**

*Kulcsszavak: Process Analytical Technology (PAT); hatóanyag kristályosítás*

Kutatómunkám során a gyógyszeripari kristályosítás olyan nem modell alapú szabályozási lehetőségének megvalósításán dolgoztam, melyben a kívánt polimorf módosulat előállítását inline Raman és ATR-UV/Vis spektrométerek alkalmazásával végeztem. A visszacsatolós szabályozás alapját a két analitikai módszerrel folyamat közben rögzített spektrumok azonnali kiértékelése adja, illetve az ebből számolt pontos polimorf koncentráció. Munkám során elsődleges feladatom az ATR-UV/Vis spektroszkóp kalibrációs összefüggésének meghatározása, valamint a berendezés folyamat közbeni kiértékelő programjának tesztelése, továbbá az inline Raman és ATR-UV/Vis spektrométerek kombinációjának felhasználásával megvalósított szabályozás hatékonyságának előzetes vizsgálata. Ezen új kettős inline módszeren alapuló nem modell bázisú visszacsatolós szabályozás, a folyamatfelügyelő, és –analizáló technológiák irányelveinek megfelelően a kristályosítás szabályozásának egy újabb, a szakirodalomban eddig nem publikált hatékony lehetőségét hordozza. A dolgozatomban összegzésre kerül az ATR-UV/Vis többváltozós kalibrációjának menete, valamint az MLR módszerrel meghatározott kalibrációs konstansok és a modell offline validálását követő inline tesztelések eredményei. Ehhez a spektrumok rögzítését végző, tanszéken fejlesztett UVComm és RamanComm programokat használtam, melyek tesztelése is feladataim között szerepelt. Vizsgáltam a Raman spektrumok legkisebb négyzetek módszerével (CLS) történő kiértékelésének pontosságát, mely során előre betáplált referencia spektrumok segítségével számolható a rendszerben lévő komponensek spektrális koncentráció értékei. A kristályosítások során felvett UV/Vis és Raman spektrumok folyamat közbeni feldolgozását a RAUV programmal végeztem, mellyel lehetőségem nyílt a kristályosításokat mennyiségileg is elemezni és vizsgálni a későbbi szabályozás hatékonyságát.

**MUZSEK BARBARA**  
*muzsekbarbi@gmail.com*  
Vegyészmérnöki  
MSc, 2. félév  
Pannon Egyetem  
Mérnöki Kar

*Témavezető:  
Dr. Varga Tamás  
egyetemi docens, PE MK*

---

### **Biodízel előállító technológia dinamikus folyamat szimulátorának fejlesztése**

*Kulcsszavak: Dinamikus folyamat szimulátor; Biodízel előállítás; Szabályzókörök hangolása*

A dinamikus szimulátorok vegyipari üzemek tervezésekor és működésük során is kiemelt fontosságúak. Üzemeltetésnél szolgálhat operátorok képzését támogató eszközként, az üzem indítása és leállítása során pedig a kritikus lépések gyakorolhatóak, a valós technológia normál működésének veszélyeztetése nélkül.

Korunk egyik sürgető feladata a fosszilis szénhidrogének alternatív energiaforrásokkal való helyettesítése. A számos alternatív motorhajtóanyag közül az egyik legígéretesebb lehetőség a növényi olajokból, egyszerű műveletekkel előállítható biodízel. A dolgozat célja egy dinamikus folyamat szimulátor megalkotása, amely egy biodízel előállító technológiában lejátszódó folyamatokat és azok hatását időben képes leírni, illetve meghatározni. Továbbá a szimulátor alapján olyan technológiai fejlesztési lehetőségek is vizsgálhatóak, melyek javítják a technológia teljesítőképességét.

A dolgozat ismerteti a technológia stacioner és dinamikus szimulátorának fejlesztési lépéseit. Tartalmazza az egyes műveleti egységek installációs lépéseinek leírását mind stacioner, mind dinamikus módban, az ehhez szükséges optimális működési paraméterek és a készülék méretek meghatározásával egyetemben. Ezt követően taglalja azon szabályozó körök kialakítását, hangolását is, amelyek a normál üzemmenet során a rendszerre érkező változtatások hatását hivatottak mérsékelni, kompenzálni. Az elkészült szimulátor alkalmas különböző irányítási struktúrák összehasonlítására, illetve a kialakított szabályozó körök paramétereinek különböző hangolási technikákkal történő meghatározására. Lehetőség adódik az egyes műveleti paraméterek megváltoztatásának hatásait vizsgálni a teljes rendszer időbeli viselkedésére is, valamint üzemmódok közötti váltási stratégiák optimális kialakítására.



**NUSSER DÁVID GYÖRGY**

david.nusser95@gmail.com

Vegyésmérnök

BSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Nagy Zsombor Kristóf  
egyetemi adjunktus, BME VBK*

---

## **Folyamatos gyógyszeripari homogenizáló rendszer fejlesztése, valós idejű Raman kontroll megvalósításával**

*Kulcsszavak: QbD; PAT; poradagolás; in-line analitika; minőségbiztosítás*

A demográfiai változások, a készítményekkel szembeni növekvő minőségi elvárások és az ehhez kapcsolódó fejlesztési költségek megugrása révén a gyógyszeripar napjainkban olyan új kihívásokkal szembesül, amik a jelenlegi működési modell átalakítását teszik szükségessé. Erre válaszul indult meg a legújabb technológiák iparági integrációja, melyek közül a legnagyobb változást a tradicionálisan szakaszos gyártás folyamatossá tétele, illetve az ehhez szükséges valós idejű analitika és a visszacsatolások megvalósítása jelenti.

A munkám során egy komplex, Raman kontroll alapú, folyamatos, homogenizáló rendszer fejlesztését tűztem ki célul, ami a fent leírt új kihívásoknak egyszerre felel meg. A berendezés egy gravimetrikus, illetve egy volumetrikus adagolót, egy folyamatos homogenizálót és egy in-line Raman szondát foglal magában. A rendszer a por alapú gyógyszerek formulálásánál azért egyedülálló, mert – bár technológiailag nagyon hasznos – idáig ezen a területen nem készült Raman-jel felhasználó visszacsatolás. Munkám két fő részből tevődik össze: egy szoftveres fejlesztésből, ami magában foglalja az eszközök (mérleg, PLC, adagoló) közötti kommunikáció megalkotását és a Raman-jel alapú visszacsatolás integrációját, valamint a rendszer gyógyszeripari felhasználhatóságát érintő tesztelésből.

A rendszer kulcsát képező adagolóval végzett kísérletek során tapasztalt pontosság, robusztusság, stabilitás alapján megállapítható, hogy a berendezés teljesíti az FDA szabványban előírt határértékeket, így a gyógyszergyártásban is használható porok adagolására. Ezenkívül a folyamat monitorozásával nyert információk révén meghatároztam a kis szemcseméretű poroknál fellépő kitapadás pontos nagyságát, és vizsgáltam egy olyan „okos” technológia megvalósíthatóságát, ami a jelenség kompenzálása révén tovább csökkentené a selejt mennyiségét.

A folyamatos homogenizáló rendszer megalkotása fontos előrelépést jelent a por alapú gyógyszerek formulálásánál, hiszen az in-line analitika segítségével a jól kontrollált gyártás megvalósításán túl, a minőségbiztosítás is ugrásszerűen javulhat, lehetőséget teremtve a valós idejű felszabadítás elérésére, ami a cégek számára egyszerre eredményez időbeli és anyagi megtakarítást. Ezért a homogenizálási lépést – egy futószalag segítségével – közvetlenül a tablettázógéppel kívánjuk összekapcsolni, ezáltal megvalósítva a por alapú készítmények folyamatos formulálását.

**TARJÁNI ARIELLA JANKA**

*janka21@gmail.com*

Vegyésszmérnök

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Mizsey Péter*

*egyetemi tanár, BME VBK*

---

### **Hagyományos és osztófalas desztilláló kolonnák szabályozhatóságának összehasonlító elemzése**

*Kulcsszavak: Aspen; modellezés; irányítástechnika; osztófalas rektifikáló kolonna; d-függvény*

Munkám során hagyományos és osztófalas desztilláló kolonnák irányítástechnikai viselkedését vizsgáltam az Aspen Plus folyamat-szimulátor és a MATLAB numerikus programcsomag segítségével. A vizsgált konstrukciók között szerepelnek a hagyományos direkt és indirekt kolonnakapcsolások illetve az ezeknek megfelelő két osztófalas kolonna, melyek közül az egyikben az elválasztófal az oszlop felső, a másikban az oszlop alsó részén helyezkedik el. Az esettanulmányok során különböző szeparációs indexű háromkomponensű alkoholelegyek elválasztására alkalmas technológiákat vizsgáltam.

Az eljárás során elkészítettem az alkohol elegyeket elválasztó desztilláló oszlopok rigorózus modelljét az Aspen Plus professzionális folyamat-szimulátor segítségével. Az egyes rendszerek dinamikus viselkedésének vizsgálatát az Aspen Dynamics szoftverrel végeztem. A Control Design Interface modul segítségével meghatároztam az egyes rendszerek dinamikus viselkedésére jellemző állapotegyenlet mátrixokat. Ezek alapján a frekvenciafüggő irányítástechnikai mutatókat a MATLAB használatával számoltam. Ezzel a módszerrel három különböző frekvenciafüggő irányítástechnikai mutatót határoztam meg, ezeket a statisztikából ismert D-függvénnyel (Desirability function) integráltam egy mutatóvá, így képezve az összehasonlítás alapját az egyes technológiák között.

**HAMADI OMAR PÉTER**

*kishamadi@gmail.com*

Vegyésszmérnök

BSc, 5. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Varga Tamás*

*egyetemi docens, PE MK*

---

### **Kén-hidrogén szelektív abszorpciójának modell alapú vizsgálata**

*Kulcsszavak: Kénhidrogén; szelektív; abszorpció; modell; dinamikus*

Az energia ipar egyik legfontosabb célkitűzése az egyre tisztább energiahordozók előállítása úgy, hogy a közben növekvő globális energiaigényt kielégítse. Tisztább energiahordozók használatának fő célja a környezetszennyezés csökkentése és a vegyipari berendezések, csővezetékek korróziójának megelőzése. Az egyik legtisztább energiahordozó a földgáz, mely a szerves komponensek mellett olyan nem szerves szennyezéseket tartalmazhat, mint a szén-dioxid és a kén-hidrogén. Az ipari igényeknek megfelelően számos olyan helyzet fordulhat elő, amikor a gázelegyben lévő komponensek közül csak egyik, vagy másik eltávolítása fontos a felhasználás előtt. A Pannon Egyetem Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék munkatársai megalkottak egy SCT (Short Contact Time) abszorber berendezést, mely a kénhidrogén szelektív eltávolítására alkalmas. Ennek a berendezésnek a kifejlesztéséhez szükséges mérési adatokat a tanszék, egy hasonló abszorber szimulátorának elkészítéséhez rendelkezésemre bocsátotta.

A TDK dolgozatom fő célja, a fent említett abszorber dinamikus szimulátorának elkészítése volt. Munkám során olyan szoftverek álltak rendelkezésemre, mint az Aspen HYSYS, melynek segítségével megállapíthattam, hogy adott üzemi paraméterek között mely termodinamikai becslőmódszer alkalmazásával kapjuk a legpontosabb eredményt. Dolgozatomban egy olyan eszközt mutatok be, amely a tartományok ismeretében, a rendszer viselkedésének leírásához legmegfelelőbb tulajdonságbecslő módszerre tesz javaslatot. A másik általam használt szoftver a numerikus számítások elvégzésére alkalmas MATLAB volt, mellyel az abszorber dinamikus viselkedését leíró mérlegegyenletek megoldását végeztem. Az itt kidolgozott szimulátor alapján és a mérési adatokat alapul véve meghatároztam a vizsgált gázelegyet alkotó komponensek kémiai reakcióval kísért abszorpciójának folyamatát.

**CZECZON ZSOMBOR**

*czzs94@gmail.com*

Vegyésmérnöki BSc

BSc, 6. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Székely Edit*

*egyetemi docens, BME VBK*

---

### **Növényi kivonat finomítása antiszolvens kristályosítással**

*Kulcsszavak: fekete nadálytő; pirrolizidin alkaloid; extrakció; antiszolvens frakcionálás; HPLC*

A modern gyógyászatban egyre nagyobb hangsúlyt kap a gyógynövények használata a betegségek kezelése és a fizikai állapot javítása érdekében. Egy fontos hazai gyógynövény a fekete nadálytő, melyet sebek kezelésénél használnak. A növényben többek között allantoin található, mely serkenti a vérellátást, növeli a sejtek regenerációs folyamatait, hám- és sejtkepző hatása gyorsítja a sebgyógyulást. A termékek forgalmazását a pirrolizidin alkaloidok miatt korlátozzák, mely vegyületek hepatotoxikus hatásúak. A forgalmazás korlátozása adja a témám alapötletét, melynek célja a jelentősen csökkentett alkaloid tartalmú termékek előállítása és ezzel a készítmények szélesebb körű alkalmazhatóságának biztosítása.

Témám során fekete nadálytő gyökér extrakciójával és az extraktumok antiszolvens kristályosításával foglalkoztam olyan gyógyhatású kivonatok készítésének érdekében, melyek akár belsőleg is felhasználásra is alkalmasak. Soxhlet és a hagyományos kevertetési extrakciót végeztem. A kevertetési extrakció kivonatait szén-dioxid gáz antiszolvens kristályosítással dolgoztam tovább. Az oldószer víztartalmának növelésével és az oldószer-drog arány növekedésével a kivonatok feldolgozásakor művelettani nehézségeket tapasztaltam. Mivel a kivonatok feldolgozása jelentős nehézséget okozott, így elkezdtem vizsgálni a kivonatok antiszolvens frakcionálását.

A szén-dioxidos antiszolvens frakcionálás célja szelektív hatóanyag-tartalmú, jól kezelhető és lehetőleg porszerű természetes kivonatok előállítása. Antiszolvens kristályosítás közben a kevertetési extrakció során felhasznált oldószerek polaritását a bevezetett szén-dioxid megváltoztatja. Így a poláris komponensek kiválnak az oldatból. Növényi kivonatok antiszolvens továbbfeldolgozásával a szakirodalom csak az utóbbi évtizedben kezdett el foglalkozni, és hazánkban ezek az első ilyen kísérletek. A fekete nadálytő számos gyógyhatását főként az allantoin tartalmának tulajdonítják, így az analitikai vizsgálat során az allantoin tartalom alapján értékeltem a kivonatokot.

Etanol oldószer esetén a raffinátum jelentősen dúsul allantoinban, míg metanol oldószer esetén teljesül a termék kezelhető, porszerű állagának kialakulása. Természetesen az eredményeim alapján további kísérletek és analitikai vizsgálatok elvégzése javasolt, főként pirrolizidin alkaloid tartalom vizsgálatában. Amennyiben az egyes kivonatok pirrolizidin alkaloid tartalma jelentősen csökkentett, a kutatás áttörést jelenthet a készítmények belsőleg felhasználásában.

**FARKAS BALÁZS**

*woolfar@gmail.com*

Vegyésmérnöki

BSc, 8. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Marosi György*

*egyetemi tanár, BME VBK*

---

### **Olvadék szálfűvés gyógyszer technológiai alkalmazása**

*Kulcsszavak: amorf szilárd diszperzió; carvedilol; gyorsított kioldódás; extrúzió; formulálás*

Az utóbbi időben felfedezett hatóanyagok jelentős részének gyenge vízoldhatósága miatt a gyógyszerkészítményekkel nem érhető el a kívánt terápiás hatás és megfelelő biohasznosíthatóság a szervezetben, ami azonban új formuláció bevezetésével megoldható. Sikeresen alkalmazzák a szilárd diszperziókat, melyek szilárd, legtöbbször polimer hordozós, hatóanyag-tartalmú rendszerek. A változatos szilárd diszperziós előállítási módszerek közül ígéretes lehetőség az elektrosztatikus szálképző technológiák alkalmazása, mely során egy polimer oldatból vagy olvadékból nagyfeszültségű elektrosztatikus erőter hatására nagy fajlagos felületű szálak szövődik, a módszer amorfizáló hatásának köszönhetően javíthatóak a hatóanyagok kioldódási jellemzői. Az olvadék szálfűvés során az alapanyag olvadékát nagysebességű gázáramba táplálják, melynek húzóereje hozza létre a szálakat. Az eljárás oldószermentes és jelentősen nagyobb termelékenységet lehet elérni vele, mint az elektrosztatikus szálképző módszerekkel, azonban gyógyszer technológiai alkalmazására eddig nem volt példa.

Ezek alapján a kutatómunkám célja gyorsított hatóanyag-leadású szilárd diszperziók előállítása volt olvadék szálfűvéssel és az ezzel az új módszerrel készült szálak összehasonlítása az elektrosztatikus szálképző technológiákkal és az extrúzióval készült termékekkel. Modell hatóanyagként a carvedilolt, a vékonybél semlegeshez közeli kémhatású közegében különösen gyengén oldódó gyenge bázist alkalmaztam.

A kristályossági fok vizsgálatok kimutatták, hogy valamennyi mintában amorf állapotú volt a hatóanyag, míg a HPLC tisztaságvizsgálatok alapján a minták szennyezettsége is elfogadhatónak bizonyult. Valamennyi formuláció gyorsított kioldódást mutatott semleges közegben a nagy fajlagos felületnek és a hatóanyag amorf formájának köszönhetően, az olvadék alapú szálképző módszerek figyelemre méltóan teljesítettek. Az eredmények alapján az olvadék szálfűvés eredményesen alkalmazható gyorsított hatóanyag-leadású készítmények előállítására.

**BOBEK JANKA**

*bobek.janka@gmail.com*

Vegyésmérnöki MSc

MSc, 4. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Rippelné Dr. Pethő Dóra*  
*egyetemi adjunktus, PE MK*

*Molnár Éva*  
*PhD hallgató, PE MK*

---

**Savas karakterű gázok kén-hidrogén tartalmának megkötése jet reaktorban, alkáli-lúgos közegben**

*Kulcsszavak: savas gáz; komppetíció; abszorpció; tartózkodási idő*

A földgáz természetes, primer energiaforrás. A földgáz könnyű paraffinok mellett számos olyan komponenst (víz, ammónia, kén-hidrogén) tartalmaz, melyek nem kívánatosak. Ezen komponensek korróziót okoznak, csökkenthetik a feldolgozás során használt katalizátorok élettartamát, csővezeték eltömődést okozhatnak. Így a feldolgozás előtt elsődleges ezen komponensek eltávolítása. Dolgozatomban szelektív kén-hidrogén eltávolítással foglalkozom olyan gázból, mely széndioxidot is tartalmaz. Számos módszer ismert és elterjedt az iparban kén-hidrogén-mentesítés céljából, ezek a membrán szeparáció, az adszorpció, a folyadék fázisú oxidáció, a fizikai oldószeres módszer valamint az abszorpció. Munkám során alkáli-lúgos abszorpciót alkalmaztam. Az alkáli-lúgos abszorpció során a szén-dioxid és kén-hidrogén között kompetitív kemisorpció zajlik le. A komppetíció jelenségének megismerése érdekében egy abszorbens szempontjából szakaszos, töltetes gáztisztító berendezésen végeztem méréseket. A vizsgálatok során megtapasztaltam a széndioxid kedvezőtlen hatását a kén-hidrogén-mentesítésre. A kén-hidrogén megkötés támogatható alacsony tartózkodási idő biztosításával. Ezért célom volt egy olyan konstrukciójú berendezésben méréseket végezni, amiben kis kontaktidőt és intenzív érintkeztetést tudok biztosítani, így támogatva a kén-hidrogén megkötődést. Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék által kidolgozott eljárással egy speciális kialakítású berendezésben vizsgáltam a gáztérfogatáram, a tartózkodási idő valamint az oldószer hatásait a kén- hidrogén-mentesítésére.

## **Kolloid- és makromolekuláris kémia**





**MOLNÁR JÁNOS**

*molnar.janos@mail.bme.hu*

Műanyag- és száltechnológiai mérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Kállay-Menyhárd Alfréd*

*egyetemi docens, BME VBK*

---

## **Az izotaktikus polipropilén optikai tulajdonságait befolyásoló szerkezeti tényezők felderítése**

*Kulcsszavak: fényszórás; homályosság; clarifier; szemikristályos polimer; szupermolekuláris szerkezet*

Az izotaktikus polipropilén (iPP) a csomagolóipar területén is széleskörűen elterjedt, egyik legdinamikusabban fejlődő tömegműanyag. Ezen iparág területén használt anyagoknak a mechanikai követelmények és az alacsony ár mellett egy harmadik, kulcs tulajdonsággal is rendelkezniük kell: megfelelő optikai tulajdonságokkal, átlátszósággal kell bírniuk.

A szemikristályos polimerek (mint az iPP), a kristályos fázis fényszórása következtében az ipar bizonyos területei által elvárt átlátszóságot önmagukban nem tudják teljesíteni. Ezeken a területeken ezért olyan amorf polimereket (polisztirol, polivinil-klorid, polikarbonátok stb.) alkalmaznak, melyek jó optikai tulajdonságokkal rendelkeznek. Szemikristályos polimerek homályosságának csökkentése céljából napjainkban, az ipari gyakorlatban nagy hatékonyságú speciális gócképzőket, úgynevezett clarifiereket alkalmaznak.

Kutatásom célja, azon szerkezeti tényezők felderítése, melyek döntően meghatározzák egy szemikristályos polimer optikai tulajdonságait, elsősorban homályosságát, illetve egy olyan modell készítése és validálása, mellyel az optikai tulajdonságok leírhatók, értelmezhetők. A modell megalkotásához előzetes méréseket végeztem különböző szerkezetű (gócsűrűség, szferolitméret, mintavastagság) mintákon, több különböző mérési módszerrel azért, hogy minél többet megtudjak a homályosságot befolyásoló tényezőkről. A modell megbízhatóságát eltérő vastagságú mintákon ellenőriztem, amiket szintén nagyon változatos körülmények között készítettem el, hogy minél szélesebb homályossági tartományban ellenőrizhessem a modellt.

Az előzetes mérések alapján, a modell alapjául szolgáló szórási egységnek a szferolitot választottam. Egyetlen szferolit esetén a mért és számított szórási kép jó egyezést mutat. A valódi mintát szóró egységek sokaságával jellemeztem és többszörös szórás figyelembe vételével számítottam az optikai tulajdonságokat (fényszórás, homályosság). A modell leírja a homályosság szferolitmérettől, mintavastagságtól és hullámhossztól való függését, illetve a szórás iránykarakterisztikáját is. A becslő és mért értékek egyezése egyelőre még nem pontos, a modell finomhangolása még folyamatban van. A célul kitűzött modell, ha a finomhangolás eredményes lesz, jelentősen gyorsíthatja majd a clarifierek fejlesztésének folyamatát. A kristályos szerkezet és optikai tulajdonságok jobb megismerése továbbá lehetőséget ad az olcsóbb szemikristályos polimerek felhasználási területének kibővítésére.

**BALÁZS CSABA**

*csaba.balazs11@gmail.com*

Vegyésmérnöki alapképzési szak

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Pukánszky Béla*

*egyetemi tanár, BME VBK*

---

### **Domináns kölcsönhatások felderítése rétegszilikát nanokompozitokban**

*Kulcsszavak: kölcsönhatás; polimer*

Manapság az élet minden területén egyre nagyobb az igény az olcsó, de mégis jó mechanikai tulajdonságokkal rendelkező műanyagokra. Egy kémiai új polimer létrehozása és gyártási technológiájának kifejlesztése rengeteg időt és pénzt igényel, ennél gyorsabb megoldás heterogén rendszerek előállítása meglévő alapanyagokból. A nanoszilikátok ideális töltőanyagnak ígérkeznek nagy fajlagos felületük és anizotrópiájuk miatt. A velük alkotott kompozitban az egyedi lemezek nagy felületen érintkeznek a polimer mátrixszal, ezért nagyszámú kölcsönhatás alakulhat ki, ami elengedhetetlen kedvező tulajdonságokkal rendelkező kompozit előállításához. A nagy határfelületnek köszönhetően kis mennyiségű rétegszilikát is elegendő az előnyös tulajdonságok eléréséhez [1].

Kutatómunkám célja annak felderítése, hogy milyen szerkezetet alakít ki a rétegszilikát különböző polimerekben és hogyan befolyásolja a kompozit jellemzőit a kölcsönhatás típusa. Ehhez ömledék állapotú feldolgozással Laponite kompozitokat készítettem különféle polimerekből. A Laponite egy szintetikus rétegszilikát, így pontosan definiált a szerkezete és a természetes rétegszilikátoktól eltérően nem tartalmaz fémszennyezéseket. A lapok 0,92 nm vastagsággal és ~25 nm átmérővel rendelkeznek, amelyek párhuzamosan, egymásra rendeződve helyezkednek el. A rendezett lemezekből álló nagyobb szemcsék nem tartoznának a nanométeres mérettartományba, de a feldolgozás során a szemcsék elméletileg egyedi lemezekké diszpergálhatók exfoliált szerkezetet kialakítva.

Az elkészített kompozitokból 1 mm vastag lapokat préseltem. A lemezek közötti rétegtávolságot röntgendiffrakcióval (XRD) vizsgáltam. A kialakult szerkezetről pásztázó elektron mikroszkópia (SEM) és digitális optikai mikroszkópia (DOM) segítségével készítettünk képet. A lapokból szabványos szakító próbatesteket vágtam ki. Állandó sebességű szakító vizsgálatokat végeztem, amiből megállapítottam az egyes kompozitok modulusát, folyási feszültségét, illetve szakítószilárdságát. Ezen tulajdonságok összetételfüggésének ismerete lehetővé teszi a töltőanyag és a mátrix közötti kölcsönhatás erősségének becslését.

[1] Dominkovics, Z., Hári, J., Kovács, J., Fekete, E., Pukánszky B.: Estimation of interphase thickness and properties in PP/layered silicate nanocomposites, Eur. Polym. J. 2011, 47, 1765-1774.

**VADAS DÁNIEL**

*vadas.daniel@gmail.com*

Vegyésmérnöki

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Marosi György*

*egyetemi tanár, BME VBK*

*Dr. Bordácsné Bocz Katalin*

*tudományos segédmunkatárs, BME VBK*

---

## **Égégátolt politejsav habok előállítása szuperkritikus széndioxiddal segített extrúzióval**

*Kulcsszavak: értéknövelt; biopolimer; fenntarthatóság; tömegcsökkentés*

A biopolimerek habosítása az elmúlt években óriási fejlődésen ment keresztül. A kutatások motivációja a műanyagipar fenntarthatóságát érintő kérdésekben keresendő. Az iparág függése a fosszilis energiahordozóktól, valamint a műanyag hulladékok által okozott környezeti károk is hosszú távú megoldást kívánnak. Kézenfekvő alternatíva a megújuló erőforrásokból előállítható, egyúttal biodegradálható polimerek használata. A fenntarthatóság egy másik megközelítési módja a termékek tömegének (ezáltal alapanyagigényének) a csökkentése, ami leghatékonyabban habosítással érhető el. A tudomány jelenlegi állása szerint a politejsav (PLA) habok válthatják ki a hatalmas mennyiségben gyártott polisztirol (PS) és polietilén (PE) habokat. Mindazonáltal, a kis sűrűségű PLA habok tömeggyártása nitrogén vagy szuperkritikus széndioxid felhasználásával mind a mai napig kihívást jelent, ennek oka a PLA eredendően kis ömledékszilárdsága. Mint a legtöbb szerves anyag, alapvetően a polimer habok is a könnyen éghető, tűzveszélyes kategóriába sorolandók. Többek között a PLA habok égésgátlását is elengedhetetlen megoldani annak érdekében, hogy a csomagolóipar mellett a jármű-, elektronikai- és építőiparban egyaránt széleskörűen elterjedhessenek.

TDK munkám célja kis sűrűségű, égégátolt politejsav habok extrúziós habosítással történő előállítása és széleskörű jellemzése volt. A megfelelő habosíthatóság elérése érdekében a választott PLA alapanyagot lánchossznövelővel és gócképzőként funkcionáló rétegszilikáttal adalékoltam, az éghetőség csökkentését pedig megújuló erőforrásból származó szénforrást tartalmazó felhabosodó égégátló adalékrendszerrel valósítottam meg. Az égégátló hatékonyság fokozása érdekében az adalékrendszer alapját képező ammónium-polifoszfátot rezorcin-bisz(difenil-foszfát) oligomerrel kezelt keményítővel, valamint diammonium-foszfáttal és bórsavval kezelt cellulózzal kombináltam. Az alapanyagokat extrúzióval homogenizáltam, a különböző mennyiségben adalékolt granulátumokat pedig szuperkritikus széndioxiddal segített extrúziós habosítással alakítottam nagy porozitású zsinórtermékké. Az elkészült PLA habok morfológiai, termoanalitikai, továbbá mechanikai és éghetőségi tulajdonságait széleskörűen vizsgáltam.

Bízom benne, hogy a kutatásom során gyártott PLA habok előnyös tulajdonságaik révén számos iparágban teret nyerhetnek, ezzel nagyban elősegítve a hagyományos, nem megújuló erőforrásokból előállított polimer habok lecserélését környezetbarát termékekre.

**SIKORA EMŐKE**

*emoke.sikora@gmail.com*

Anyagmérnök

BSc, 5. félév

Miskolci Egyetem

Műszaki Anyagtudományi Kar

*Témavezető:*

*Dr. Vanyorek László*

*adjunktus, ME MAK*

---

### **Formázott nanoszerkezetű katalizátorok fejlesztése**

*Kulcsszavak: szén nanocső; katalízis; olefin; hidrogénezés*

A katalízis területén elterjedten alkalmazott aktív szenek mellett egyre nagyobb szerephez jutnak a szintén szénelalapú, ám nanoszerkezettel rendelkező szénformák, mint a grafén, valamint a szén nanocsövek, különböző típusai.

A karbon nanostruktúrák katalízis területén tapasztalható térhódítása annak köszönhető, hogy a nanocsövek a katalitikus folyamatokban jól kamatoztatható előnyökkel rendelkeznek. Ilyen például a nano méretükből adódó nagy fajlagos felületük, az oxidációval szembeni ellenálló képességük, és nem utolsósorban kiváló hővezetők. További előnyük hogy, nem rendelkeznek mikropórusos szerkezettel, amely gátolná az reaktáns molekulák aktív centrum irányába történő diffúzióját, amely a katalitikus folyamatok sebesség meghatározó lépése. Fizikai és kémiai módszerekkel funkciós csoportok alakíthatóak ki felületükön, melyek segítségével megköthetők katalitikusan aktív fémek ionjai, valamint módosíthatóvá válik a nanocsövek poláris-apoláris jellege.

TDK munkám során előállítottunk szén nanocsöveket acetilénből CCVD szintézissel, majd ezek felhasználásával hidrogénező katalizátorokat készítettünk. Jellemeztük azokat, majd összehasonlítottuk a katalitikus aktivitásukat oktadecén hidrogénezési reakciójában. A kísérleteink során azt tapasztaltuk, hogy a legnagyobb mértékű katalitikus aktivitást az 5 m/m%-os Pd/MWCNT valamint a szintén 5 m/m%-os Rh/MWCNT katalizátorok eredményezték. Már a hidrogénezés kezdetétől számított 30 perc elteltével 90% feletti konverziót értünk el a viszonylag alacsony (50 °C) hőmérsékleten, légköri nyomáson elvégzett, kettőskötések telítése során. Az említett két katalizátor messze hatékonyabbnak bizonyult, mint a ruténium- és irídiumtartalmú katalizátorok ugyanolyan reakciókörülmények mellett.

Kutatásunk következő szakaszában az ipari igényeket szem előtt tartva olyan katalizátor kifejlesztésére törekedtünk, amely az ipari gyakorlat során jól kezelhető, könnyen elválasztható, ezért kalcium-alginát-BCNT gyöngy katalizátorokat állítottunk elő. A gömb alakú katalizátorok a butén hidrogénezése során kitűnően teljesítettek. A folyamat kezdete után 5 perccel már 98%-os konverziót regisztráltunk.

**FODOR HANNA**

2fhanna2@gmail.com

Műanyag- és száltechnológiai mérnöki mesterképzési szak

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Renner Károly*

*tudományos főmunkatárs, MTA TTK AKI Polimer Fizikai Kutatócsoport*

---

### **Határfelületi kölcsönhatások módosítása PET szál erősítésű PP kompozitokban**

*Kulcsszavak: felületkezelés; polimer szálerősítés; határfelületi adhézió; kapcsolóanyag*

Polimerek tulajdonságainak módosítására az egyik leghatékonyabb módszer polimer kompozitok fejlesztése. Hagyományos töltő- és erősítőanyagok esetén nő a kompozit merevsége, növekedhet a szilárdsága, de legtöbbször csökken a dinamikus igénybevétellel szembeni ellenállása. A kedvezőtlen hatás elasztomer további bekeverésével bizonyos határok között és kompromisszumokkal, de kompenzálható. Újszerű megközelítés, hogy az ütésállóságot olyan polimer szálak bekeverésével növeljük, melyek a feldolgozás hőmérsékletén még nem kerülnek ömledék állapotba, így erősítő szálként viselkedhetnek a kompozitokban. A koncepció önerősítésű kompozitok esetén már ismert, de a komponensek közeli olvadási hőmérséklete a feldolgozást nagymértékben megnehezíti ebben az esetben. Lényegesen eltérő polimerek szálként és mátrixként történő alkalmazása során a feldolgozás viszonylag könnyen kivitelezhető, viszont legtöbbször a nem elegyedő polimerek miatt gyenge határfelületi kölcsönhatást eredményez. Jelen kutatómunka során kísérletet teszek a polimer szálak (PET) és a mátrix (PP) közötti kapcsolat javítására a szálak kémiai és fizikai felületkezelésének segítségével, valamint különböző kapcsolóanyagok alkalmazásával. Hidegplazmás kezelést és kémiai oxidációs módszerek eredményeit hasonlítom össze, illetve színgal bevont és azt leoldott szálakat tartalmazó kompozitokat is vizsgállok. Céloom a megfelelő felületkezelési és kapcsolási módszer meghatározása az előnyös tulajdonságok eléréséhez.

**RÓTH CSABA**

*csaba231093@gmail.hu*

Anyagtudomány

MSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Varga Imre*

*egyetemi docens, ELTE TTK*

---

### **Hidrofil héj kialakítása poli(N-izopropil-akrilamid) mikrogél részecskéken**

*Kulcsszavak: intelligens mikrogél; mag-héj szerkezet; poli(N-izopropil-akrilamid); hidrofil; sztérikus stabilizálás*

Az intelligens mag-héj szerkezetű mikrogéleket az irodalom szerint általában kétlépéses eljárással állítják elő: első lépésben a részecske magját állítják elő, majd ennek felületén hozzák létre a kívánt méretű és összetételű héjat. Az alkalmazott eljárás fő hátránya, hogy nem teszi lehetővé hidrofil polimerhéjak kialakítását.

Munkám célja poli(vinil-alkohol) (PVA) héjjal rendelkező, sztérikusan stabilizált poli(N-izopropil-akrilamid) (pNIPAm) mikrogél részecskék előállítása volt. Az előállítást egy olyan, a kutatócsoportban kidolgozott egy-lépéses szintézissel végeztem, melynek során a pNIPAm mag részecskéket egy hagyományos szintézis során állítjuk elő, majd 80-90% monomer-konverziónál a rendszerhez adjuk a polimerhéjat kialakító monomert.

A nehézséget az okozta, hogy bár a pNIPAm polimerizációját általában 80 °C-on végezzük, a vinil-acetát forráspontja azonban 72,7°C. Ezért munkám első részében egy olyan zárt reaktort terveztem és építtettem, ami lehetővé tette a reakcióelegy hőmérsékletének pontos szabályozását, de megakadályozta az illékony komponensek távozását a szintézis során. Ezt követően vizsgáltam a polimerizáció kinetikájának hőmérséklet függését. A mérési eredmények alapján a pNIPAm mag szintézisét 80 °C-on végeztem, majd 80-90% monomer-konverziónál 60 °C-ra csökkentettem reakcióelegy hőmérsékletét és a reakcióelegyhez adtam a vinil-acetát monomert. Munkám következő lépése az előállított pVAc héj szelektív hidrolízisének optimalizálása volt, ami biztosította a pNIPAm magon a PVA héj kialakulását.

Befejezésül különböző pH értékeken vizsgáltam az előállított részecskék duzzadásának hőmérsékletfüggését. A kapott eredmények igazolták, hogy sikerült az irodalomban eddig ismeretlen sztérikusan stabilizált mikrogél részecskéket előállítanom, melyek számos egyedi alkalmazást tesznek lehetővé.

**KÉSMÁRKI ANDRÁS**

*kesmarki.andras@gmail.com*

Vegyésmérnöki szak

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Klébert Szilvia*

*tudományos főmunkatárs, MTA TTK*

*Románszki Loránd*

*tudományos munkatárs, MTA TTK*

---

### **Műanyagok felületi tulajdonságainak módosítása hidegplazmás eljárással**

*Kulcsszavak: felületkezelés; DBD plazma; morfológia; felületi összetétel; felületi energia*

A dolgozatom során a következő műanyagok plazmakezelésének hatásait tanulmányoztam: poliamid-6, polietilén, poli(éter-éter-ke-ton), polietilén-tereftalát, poli(metil-metakrilát) polioximetilén, polipropilén, politetrafluoroetilén. Ezeknek a gyakorlatban sokrétűen felhasználásra kerülő polimereknek a felületmódosítása jelentősen javíthatja a teljesítményüket, vagy akár új felhasználási módokat tehet lehetővé.

A polimerek felületét akadálykísülés elvén működő készülékkel (dielectric barrier discharge, DBD) kezeltem. Kémiai felületmódosító módszerekkel ellentétben ennek előnye a gazdaságosság mellett, hogy elkerülhető agresszív felületkezelő vegyszerek vagy illékony szerves oldószerek használata, amelyek környezetre káros hatással lehetnek. Más alternatív felületkezelő eljárásokkal szemben (mint például: lézer-, elektron-sugár, UV vagy gammasugárzás), a hidegplazmás eljárások nem befolyásolják az anyag tömbi tulajdonságait. A választott módszer további előnye, hogy atmoszférikus nyomáson, levegőn történik a kezelés. Ennek nagy jelentősége van az iparban, mert alkalmazása sokkal olcsóbb, mintha hasonló alacsony nyomású plazmakezelést választatnának, mivel nem kell drága vákuum rendszert használni és amennyiben a termék kialakítási is engedi (pl.: fóliák, textilek) a plazmakezelési lépés könnyen beilleszthető folyamatos termelésbe is. Az atmoszférikus DBD kezelés használata az iparban ugyan elterjedőben van, kutatási területeken főleg az alacsony nyomású technológiák felé terelődött a figyelem. Munkám során a DBD nem-egyensúlyi plazmakezelés felületre gyakorolt hatásait követtem figyelemmel. A kémiai és morfológiai változásokat atomerő mikroszkópiával, pásztázó elektron mikroszkópiával, peremszög méréssel, infravörös spektroszkópiával és Röntgen fotoelektron-spektroszkópiával vizsgáltam.

**BECSEI BÁLINT**

*modulus03@gmail.com*

Vegyész

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Iván Béla*

*egyetemi magántanár, ELTE TTK*

---

### **Poli(metil-metakrilát)-l-poliizobutilén kotérhálók szintézise és a Fox-Flory egyenlet alkalmazhatóságának vizsgálata**

*Kulcsszavak: Fox-Flory; üvegesedési hőmérséklet; olló-effektus*

A közelmúltban figyelték meg egy amfifil polimer kotérháló, a poli(N-vinil-imidazol)-l-poli(tetrahidrofurán) esetében az üvegesedési hőmérsékletek összetételfüggésének nemvárt hasonlóságát a poli(N-vinil-imidazol) homopolimerben mérhetőhez [1]. Ennek az összefüggésnek más polimer kotérhálókra történő alkalmazhatósága jelentős előrelépést jelenthet a jövő anyagainak tervezésében.

Munkám PMMA-l-PIB (poli(metil-metakrilát)-l-poliizobutilén) kotérhálók szintézisére és ezek duzzadási, valamint termikus tulajdonságainak a vizsgálatára irányult. Az eredményekből e tulajdonságoknak a PMMA láncok keresztkötések közötti átlagos molekulatömegétől ( $M_c$ ) és a PIB keresztkötő hosszától való függésének felderítése volt a célom, különös tekintettel a PMMA üvegesedési hőmérséklete és az  $M_c$  közötti Fox-Flory összefüggés alkalmazhatóságának lehetőségére.

Ehhez először előállítottam tercier-butil-dikumil-klorid iniciátort, mellyel izobutilént polimerizáltam, melynek láncvégein metakrilát csoportokat alakítottam ki több lépésben. Öt különböző átlagos molekulatömegű metakrilát-telekelikus PIB makromonomer és MMA monomer AIBN iniciátorral történő gyökös kopolimerizációjával különböző összetételekben állítottam elő PMMA-l-PIB kotérhálókat.

A kiindulási anyagok és köztitermékek minőségi analízisét  $^1\text{H}$ -NMR spektroszkópia és géppermeációs kromatográfia (GPC) segítségével vizsgáltam, a kotérhálók összetételét és fizikai, illetve termikus tulajdonságait pedig elemanalízissel, duzzadási tesztekkel illetve termogravimetriás analízissel (TGA) és differenciális pásztázó kalorimetriával (DSC). Két különböző polaritású oldószerben meghatároztam az egyensúlyi duzzadási fokokat, melyek az összetételtől és az oldószer polaritásától való függést mutattak.

Termogravimetriás mérések során vizsgáltam a minták hőstabilitását, melyek minden esetben jobbnak mutatkoztak, mint a PMMA homopolimeré, a kezdeti bomlási hőmérsékletek viszont nem mutattak jelentős összetételfüggést.

DSC analízissel megállapítottam a kotérhálók üvegesedési hőmérsékleteit. A PMMA fázis  $T_g$  értékeinek  $M_c$ -től való függését ábrázolva vizsgáltam a Fox-Flory összefüggés alkalmazhatóságát, különös tekintettel az egyenletben szereplő K anyagi konstansra és annak a PMMA homopolimerre jellemző konstanshoz való viszonyára. Ezek jó egyezéssel azonosnak adódtak, azaz a kapott új eredmények igazolják az olló-effektus jelenségét a PMMA-l-PIB kotérhálókban.

[1] Fodor Cs., Domján A., Iván B., Polymer Chemistry, 4, 3714-3724 (2013)



# **Koordinációs kémia**



**VARGA NORBERT**

*varganorbi0000@gmail.com*

Vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Sipos Pál*

*egyetemi tanár, SZTE TTIK*

*Kutus Bence*

*PhD hallgató, SZTE TTIK*

---

### **A pH = 2–8 tartományban képződő neodímium-glükonát komplexek egyensúlyi jellemzése**

*Kulcsszavak: neodímium; glükonát; kétmagvú komplex; deprotonálódás; fagyáspontcsökkenés*

A föld alatt elhelyezett, betonból készült kis és közepes aktivitású radioaktív hulladéktárolókban lejátszódó folyamatokat jelentősen befolyásolják a fémionok és szerves ligandumok között kialakuló kölcsönhatások. A redukív körülmények során képződő, háromvegyértékű aktinoidák (Pu(III), Cm(III), Am(III)) gyakran használt modellje a  $\text{Nd}^{3+}$ -ion. Ennek oka a hasonló ionsugár, a stabil +3-as oxidációs állapot és a könnyű hozzáférhetőség. A nátrium-D-glükonát ( $\text{Gluc}^-$ ) pedig a cement egyik segédanyagaként van jelen ezekben a tárolókban. A  $\text{Nd}^{3+}$ - $\text{Gluc}^-$  rendszerre vonatkozó irodalmi eredmények nem egységesek a képződő részecskék összetételét illetően, ezért célunk a 2–8 pH-tartományban kialakuló komplexek egyensúlyi és szerkezeti jellemzése volt. Vizsgálatainkat fagyáspontcsökkenés, konduktometria, spektrofotometria, pH-potenciometria, valamint  $^1\text{H}$  és  $^{13}\text{C}$  NMR-spektroszkópia segítségével végeztük el. A fagyáspontcsökkenés-mérések, valamint a konduktometriás titrálások segítségével kvalitatívan bizonyítottuk a jelentős mértékű komplexképződést és a hidroxidionok egyidejű megkötődését.

A látható tartományban felvett spektrumok alakja jelentősen függött mind az oldatok pH-jától, mind a glükonát- és neodímiumion-koncentrációtól. A rendszer jelentős pH-függését potenciometriás titrálások segítségével is alátámasztottuk. A két módszer mérési adatainak együttes illesztése alapján öt egymagvú ( $[\text{NdGluc}]^{2+}$ ,  $[\text{NdGluc}_2]^+$ ,  $[\text{NdGluc}_3]^0$ ,  $[\text{NdGlucH}_2]^0$ ,  $[\text{NdGluc}_2\text{H}_{-1}]^0$ ) és két kétmagvú ( $[\text{Nd}_2\text{G}_2\text{H}_{-3}]^+$  és  $[\text{Nd}_2\text{G}_3\text{H}_{-2}]^+$ ), nagy stabilitású komplex keletkezik a rendszerben, 25 °C-on és 1 M ionerősségen. A két utóbbi részecskét korábbi mérések során nem mutatták ki, ennek fő oka az lehetett, hogy nem vizsgálták a fémionfüggés hatását. Az eloszlási diagramok alapján nagyobb analitikai koncentrációk esetén, pH = 5 felett a többmagvú részecskék képződése meghatározó. A radioaktív hulladéktárolókban azonban az alacsony fémion- és ligandumkoncentráció miatt ( $10^{-7}$ , ill. 0,01 M) ezek a többmagvú komplexek nem alakulnak ki.

A neodímiumion-koncentrációfüggő  $^1\text{H}$  NMR-spektrumok alapján a ligandum elsődleges koordinációs helyei a 2-es és 3-as szénatom hidroxilcsoportjai (a karboxilátion mellett). A pH-függő ( $4 < \text{pH} < 8$ )  $^1\text{H}$  és  $^{13}\text{C}$  NMR-mérések alátámasztották ezt a következtetést. A  $6 < \text{pH} < 8$  között felvett spektrumok ugyanakkor jelentősen kiszélesednek, ami erősebb fémion-ligandum kölcsönhatásra, illetve deprotonált komplexek jelenlétére utal.

**TRAJ ADRIÁN**

*trajadrian@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Gajda Tamás*

*egyetemi tanár, SZTE TTIK*

*Matyuska Ferenc*

*PhD hallgató, SZTE TTIK*

---

### **Átmenetifém-komplexek enzimutánzó sajátságainak finomhangolása**

*Kulcsszavak: tripodális ligandum, átmenetifém-komplexek, oldatszerkezet-vizsgálat, pirokatechin-oxidáz modell*

A modern bioszervetlen kémia egyik nagy kihívása a metalloenzimek aktív centrumának modellezése kis molekulatömegű fémkomplexekkel. A tripodális ligandumok alkalmasnak tűnnek az ilyen biomimetikus modell kifejlesztéséhez, hiszen megfelelő szubsztituensek esetén ezek preorganizált szerkezete a nagy fémion affinitás mellett további funkciók kialakítását is lehetővé teszi. Két széles körben vizsgált tripodális platform a trisz(2-aminoetil)amin (tren) és a cisz,cisz-1,3,5-triaminociklohexán (tach). Kutatócsoportunkban korábban előállított egy pirazolgyűrűvel szubsztituált tach-származékot [1], melynek hárommagvú réz(II)komplexei érdekes szerkezettel és kiemelkedő oxidáz aktivitással bírnak. Kíváncsiak voltunk, hogy az analóg tren-származék esetén a tercier nitrogén jelenléte hogyan változtatja meg a koordinációs és enzimutánzó sajátságokat. Ezért célul tűztük ki egy új tren-származék, a trisz(5-pirazolilmetil-aminoetil)amin szintézisének kidolgozását, átmenetifém-komplexeinek egyensúlyi, szerkezet-, és enzimutánzó képességének vizsgálatát.

Vizsgált ligandumunk átmenetifém-ionok jelenlétében igen stabilis, egymagvú (MHL, ML, ML(OH)) komplexeket alakít ki, amelyek geometriája négyzetes piramis vagy trigonális bipiramis. Az ML komplexek stabilitása jóval nagyobb, mint az analóg tren komplexeké, ami 1-2 pirazol-nitrogén kiegészítő koordinációjára utal. Réz(II) jelenlétében hárommagvú ( $\text{Cu}_3\text{H}_x\text{L}_2$ ,  $x = 2-4$ ) komplexek képződését is tapasztaltuk, amelyek pirazolát-hidas szerkezete feltehetően hasonló az analóg tach-származék komplexeihez [1]. Ugyanakkor a két ligandum hárommagvú komplexeinek relatív stabilitása jelentősen eltér.

Eredményeink szerint a hárommagvú réz(II)komplexek hatékonyan képesek elősegíteni a 3,5-di-tercbutil-pirokatechin dioxidigén általi oxidációját. Megállapítottuk, hogy a reakció leírható a Michaelis-Menten modell segítségével. A tach-származékhoz hasonlóan [1] az általam vizsgált rendszerben is döntően a  $\text{Cu}_3\text{H}_3\text{L}_2$  összetételű komplexhez rendelhető a tapasztalt katalitikus aktivitás. Összehasonlítva a két aktív komplex pH-profilját megállapítottuk, hogy a tripodális platform koordinatív tulajdonságai révén finomhangolhatóak a komplexek enzimszerű sajátságai. [1]: Szorcsik, A., et al., Dalton Trans. 2016, 45, 14998-15012.

**BÖSZÖRMÉNYI ÉVA**

*boszormenyi.eva@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Sipos Pál*

*egyetemi tanár, SZTE TTIK*

*Dudás Csilla*

*PhD hallgató, SZTE TTIK*

---

### **Az izoszacharinát- és a glükonát-ion sav-bázis és kalcium-kompleképző tulajdonságainak összehasonlítása**

*Kulcsszavak: polihidroxi-karboxilát; ligandum; stabilitás; deprotonálódás*

Kutatásunk célja a kalcium-ion –  $\alpha$ -D-izoszacharinát ( $\text{ISA}^-$ ) egyensúlyi rendszer kvantitatív leírása volt semleges és lúgos közegben, valamint az  $\text{ISA}^-$  viselkedésének összehasonlítása a D-glükonát ( $\text{Gluc}^-$ ) hasonló körülmények között mutatott viselkedésével.

Munkánk során potenciometriás méréseket végeztünk kalcium-ionszelektív elektród alkalmazásával semleges közegben, állandó hőmérsékleten ( $T=25\text{ }^\circ\text{C}$ ) és ionerősségen ( $I = 1\text{ M}$ ) a képződő  $[\text{CaISA}_x]^{(2-x)}$  komplexek stabilitási állandóinak meghatározása céljából.  $^1\text{H}$  és  $^{13}\text{C}$  NMR spektroszkópia segítségével vizsgáltuk az  $\text{ISA}^-$  alkoholos OH-csoportjának deprotonálódását, és a kapott kémiai eltolódások változásai alapján megbecsültük az  $\text{ISA}^-$  OH-csoportjának deprotonálódási állandóját. A  $\text{Ca}^{2+}$ -ot és  $\text{ISA}^-$ -t tartalmazó lúgos közegű rendszerekben a komplexképződés lejátszódását  $^1\text{H}$  és  $^{13}\text{C}$  NMR spektrumok felvételével bizonyítottuk.  $\text{H}_2/\text{Pt}$  elektród alkalmazásával pH-potenciometriás méréseket végeztünk az erősen lúgos közegben képződő Ca–ISA komplex(ek) stabilitási állandójának meghatározására. A titrálásokat minden esetben állandó hőmérsékleten ( $T=25\text{ }^\circ\text{C}$ ) és állandó ionerősségen ( $I = 1\text{ M}$ ) hajtottuk végre. A képződő komplexben a ligandum kötőhelyeit hőmérsékletfüggő  $^1\text{H}$  NMR spektrumsorozat segítségével valószínűsítettük.

A kapott eredményeinket összehasonlítottuk a  $\text{Gluc}^-$ -ra hasonló körülmények között nyert adatokkal, megállapítottuk, hogy a két ligandum viselkedése  $\text{Ca}^{2+}$ -ionok jelenlétében semleges közegben hasonló, azonban lúgos közegben jelentős eltéréseket mutat. Ennek alapján a  $\text{Gluc}^-$  nem megfelelő modellvegyülete az  $\text{ISA}^-$ -nak erősen lúgos kalcium tartalmú oldatokban, sem a komplexek összetételét, sem pedig szerkezetét tekintve.

**VARGA MÁRTA GEORGINA**

*gina.varga@hotmail.com*

Kémia

BSc, 7. félév

Pécsi Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Kollár László*

*egyetemi tanár, PTE TTK*

*Dr. Takács Attila*

*tudományos munkatárs, PTE TTK*

---

### **Dijód-heteroaromások aminokarbonilezési reakciói**

*Kulcsszavak: szén-monoxid; palládium; dijód-piridin; amid; cikloaminokarbonilezés*

Napjainkban az átmenetifém-katalizátorokat széles körben alkalmazzák, mert segítségükkel nagy szelektivitással, jó hozammal és viszonylag egyszerűen szintetizálható a kívánt termék. A szén-monoxid aktiválása és C1-es építőelemként történő felhasználása homogénkatalitikus reakciók során nagy sikernek örvend. Az ilyen karbonilezési reakciók elengedhetlenné váltak a karbonsavak és származékaik szintézise során. Az alkenil- és aril-jodidok palládium-katalizált aminokarbonilezése N-nukleofil jelenlétében kulcsfontosságú reakció a karbonsavamid származékok szintézise szempontjából. A heteroaromás vázhoz kapcsolódó amid funkciós csoport kiemelkedő jelentőségű, mivel számos helyen előfordul a farmakológiai jelentőségű vegyületekben. TDK munkámat a Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Karának Szervetlen Kémia Tanszékén végeztem. Kísérleteim során 2,5-, 2,3- és 3,4-dijód-piridin aminikarbonilezését végeztem el számos, különböző amin jelenlétében. Nagy figyelmet szenteltem a regio- és kemoszelektivitás, valamint a kémiai szerkezet közötti összefüggésének vizsgálatának. 2,5-Dijód-piridin anilin és alanin-metilészter jelenlétében végzett aminokarbonilezési reakciója során a várt karbonsavamido és ketokarbonsavamido származékot állítottam elő. A jód-szubsztituensek eltérő reaktivitásának kihasználásával és az optimális reakciókörülmények megválasztásával a megfelelő monojód-monoamid szintézisét valósítottam meg. A monojód-monoamid izolálása után lehetőségem nyílt annak továbbreagáltatására aminokarbonilezési reakcióban piperidin jelenlétében. Ilyen módszerrel egy eltérő amid funkciós-csoportokat tartalmazó termék szintézisét sikerült megvalósítanom. Abban az esetben, ahol a szubsztrátum orto-pozícióban jód-szubsztituenseket tartalmazott (2,3-dijód-piridin, 2-klór-3,4-dijód-piridin) 40 bar CO nyomáson számos primer amin jelenlétében cikloaminokarbonilezési reakcióban N-szubsztituált imidek szintézisét valósítottam meg. Az előállított termékeket izoláltam és szerkezüket meghatároztam nagyműszeres analitikai módszerekkel (IR, GC-MS, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR).

**MÉSZÁROS JÁNOS PÉTER**

*meszaros.janos.peter.1@gmail.com*

Vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezető:*

*Enyedy Éva Anna*

*egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

---

### **Félszendvics ródiumkomplexek oldatkémiája és szerkezetvizsgálata**

*Kulcsszavak: 1,10-fenantrolin; stabilitási állandó; XRD; HSA; DNS*

A Pt(II)-tartalmú ciszplatint és származékait sikerrel alkalmazzák a rákos betegek kezelésében. Súlyos mellékhatásaik elkerülésének érdekében új, más hatás-mechanizmusú rákellenes fémkomplexek előállítását célozzák meg a kutatások: megváltoztatható a Pt központ oxidációs állapota, illetve a központi fémion is lecserélhető egy másik platinafém (Ru, Os, Rh, Ir) ionjára. A fémorganikus, Ru(II)-tartalmú RAED és RAPTA-komplexekkel már számos biztató állatkísérlet folyt [1]. A Ru(II)-ionnal izoelektronos Os(II), Rh(III) és Ir(III) rákellenes félszendvics komplexei szintén jól ismertek az irodalomban [2]. A pentametil-ciklopentadienil-ródium(III) komplexei közül a (N,N)-donoratomokat tartalmazó 1,10-fenantrolin és ennek származékai is aktívnak mutatkoztak in vitro, azonban oldategyensúlyi viszonyaikról kevés információ van az irodalomban.

Munkánk során négy félszendvics Rh(III) komplexet tanulmányoztunk korábbi vizsgálataink [3] folytatásaként, melyekben egy kétfogú (N,N) donoratomokat tartalmazó vegyület koordinálódik: N,N'-dimetil-etilén-diamin, N,N,N',N'-tetrametil-etilén-diamin, 2-pikolilamin és 1,10-fenantrolin. A komplexek stabilitási állandóit, a deprotonálódásukat jellemző egyensúlyi állandókat és a klorid-ion-affinitásukat is meghatároztuk tiszta vizes közegben: ehhez pH-potenciometriás, UV-látható spektroszkópiás és <sup>1</sup>H NMR méréseket használtunk. Az előállított egykristályok röntgenkristallográfiás méréséből nyert geometriai paraméterek és az egyensúlyi állandók közötti korrelációkat is elemeztük, melynek eredménye segítheti a biológiailag aktív komplexek tervezését a jövőben. Valamint tanulmányoztuk ezen komplexek kölcsönhatását humán szérum albuminnal és CT-DNS-sel. Ezekhez a mérésekhez <sup>1</sup>H NMR-t, spektrofotometriás és ultraszűrési módszereket használtunk.

[1] Murray B.S., Babak M.V., Hartinger C.G., Dyson P.J., Coord. Chem. Rev., 306, 86-114 (2016)

[2] Scharwitz M.A., Ott I., Geldmacher Y., Gust R., Sheldrick W.S., J. Organomet. Chem., 693 (13), 2299-2309 (2008)

[3] Enyedy E.A., Mészáros J.P., Dömötör O., Hackl C.M., Roller A., Keppler B.K., Kandioller W., J. Inorg. Biochem., 152, 93-103 (2015)

**BARTAL BRIGITTA**  
*bartalbrigi15@gmail.com*  
Vegyész  
MSc, 1. félév  
Pécsi Tudományegyetem  
Természettudományi Kar

*Témavezetők:*  
*Dr. Kollár László*  
*egyetemi tanár, PTE TTK*  
*Dr. Pongrácz Péter*  
*tudományos munkatárs, PTE TTK*

---

### **Hidroformilezés környezetbarát gamma-valerolakton oldószerben**

*Kulcsszavak: Hidroformilezés; gamma-valerolakton; homogén katalízis*

Prokirális olefinek (sztirol,  $\alpha$ -metil-sztirol és dimetil-itakonát) aszimmetrikus hidroformilezését végeztük ródium-tartalmú homogén katalizátorok jelenlétében. A reakció oldószereként  $\gamma$ -valerolakton (GVL) alkalmaztunk, mely biomasszából nyerhető, biológiailag lebomló 'zöld' oldószernek tekinthető. Az in situ képződő katalizátorok ligandumaiként változatos kiralitáselemeket tartalmazó kétfogú foszfinokat használtunk (BDPP, DIOP, BINAP, QUINAP, SEGPHOS, JOSIPHOS). A kapott eredményeket hagyományos szerves oldószerben, toluolban kapott eredményekkel összevetve megállapítható, hogy a katalizátorok aktivitása GVL-ben kissé elmarad a toluolban kapott értékektől mindhárom szubsztrátum esetében. Sztirol hidroformilezésekor változatlan kemoszelektivitás mellett, a lineáris aldehid képződése kissé kedvezőbb, míg  $\alpha$ -metil-sztirol esetében a kemo- és a regioszelektivitás azonos a két vizsgált oldószerben. Dimetil-itakonát hidroformilezésekor GVL-ben csak a hidrogénezési mellékreakció figyelhető meg, míg toluolban, bár kis szelektivitással, de megjelennek az aldehidek. Az optikai hozamokat tekintve mindkét oldószerben alacsony enantiomer túlsúlyt sikerült elérni, mindhárom szubsztrátum esetében. A ligandum/katalizátor prekursor arány növelésével (BDPP/Rh = 3/1) sikerült kissé nagyobb enantioszelektivitást elérni (9%). A katalizátor visszanyerésének és újra felhasználhatóságának vizsgálatát elvégeztük, melynek során három vizsgált ciklus során nem tapasztaltunk jelentős aktivitás, illetve szelektivitás csökkenést.



**TÓTH BOTOND**

*kemiaorarabotinak@gmail.com*

Kémia

BSc, 6. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:*

*Dr. Buglyó Péter*

*egyetemi docens, DE TTK*

---

### **Ida- és foszfonátjainak kölcsönhatása a $[(\eta^6\text{-p-cym})\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ -ionnal**

*Kulcsszavak: félszendvics; ruténium; komplex, stabilitási állandó; foszfonát*

TDK munkám során a  $[(\eta^6\text{-p-cym})\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ -ion kölcsönhatását vizsgáltam az imino-diecetsavval (Ida), illetve ennek foszfonsavszármazékaival az IdaP-vel és Ida2P-vel pH-potenciometriásan, NMR spektroszkópiával és ESI-MS módszerrel.

A ligandumok protonálódási állandóit és a komplexek stabilitási szorzatait illetve összetételüket pH-potenciometriásan határoztuk meg.

Ezen eredmények alátámasztására  $^1\text{H}$ -NMR vizsgálatokat végeztünk, melyek az Ida kivételével megerősítették a pH-potenciometriás feltevéseinket, miszerint a  $\text{Ru}(\text{II})$ -ion két foszfonsavval képzett komplexei már protonált formában is tridentát kötőmódúak. Ida esetén a  $^1\text{H}$ -NMR nem támasztja alá a pH-metriával számolt  $[\text{MAH}]^+$  jelenlétét. Ennek tisztázására további vizsgálatokra van szükség. A  $[(\eta^6\text{-p-cym})\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ -ion Ida-val, IdaP-vel és Ida2P-vel történő kölcsönhatásának oldategyensúlyi vizsgálataival azt találtuk, hogy mindhárom ligandum kiváló liganduma a fémionnak, széles pH tartományban és fiziológias pH-n is stabil, 1:1 arányú tridentát komplexet képez, két öttagú kelátot kialakítva, illetve megvédi a fémiont a hidrolízistől. További terveink között szerepel a komplexek szilárd fázisban történő előállítása, jellemzése és ezek biológiai vizsgálata.

**FARAGÓ TÜNDE**

*f.tunde94@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Gácsi Attila*

*doktorjelölt, SZTE TTIK*

*Sipos Pál*

*egyetemi tanár, SZTE TTIK*

---

### **Nátrium ionszelektív elektród jellemzése és alkalmazása Na-ionpárok stabilitási állandójának megállapítására nagy ionerősségen**

*Kulcsszavak: potenciometria; a NaCit<sup>2-</sup> (aq) és Na<sub>2</sub>Cit<sup>-</sup> (aq) ionpárok; TMACl*

Jelen munkában a citrát ( $\text{Cit}^{3-}$ ) és a  $\text{Na}^+$  ionok között lejátszódó ionpárképződési folyamatok egyensúlyi viszonyait vizsgáltuk potenciometriás módszerrel, nátrium ionszelektív elektród (Na-ISE) alkalmazásával. A méréseket állandó ionerősségeken és hőmérsékleten hajtottuk végre. A háttélelektrolit koncentráció beállítására két sót (KCl és tetrametilammónium-klorid, TMACl) használtunk, ezek közül csak a TMACl bizonyult alkalmazhatónak. Az elektródot a kapott titrálási görbe LOL (Limit of Linearity) értékével is jellemeztük és ezeket az értékeket összehasonlítottuk a két kipróbált háttér elektrolit beállítására szolgáló só esetén. A nátrium-citrát ionpárok képződési állandójának meghatározásával eddig csak nagyon kevés munkában találkozhattunk és szinte senki sem végzett méréseket az általunk alkalmazott nagy ionerősségeken ( $I = 0,5 - 4 \text{ M}$ ). Potenciometriás méréseinket fagyáspontcsökkenés mérésekkel is kiegészítettük. Mérési eredményeink alapján megállapítottuk, hogy a fenti kísérleti feltételek mellett TMACl tartalmú oldatokban 1:1 és a 2:1 összetételű ionpárok képződnek. Meghatároztuk a képződő ionpárok stabilitási állandóit és az ionerősség függés alapján becslést adtunk az állandók  $I = 0 \text{ M}$ -ra vonatkozó értékeire is.

**LUKÁCS MÁRTON**

*marci9208@gmail.com*

Vegyész

MSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:*

*Dr. Várnagy Katalin*

*egyetemi tanár, DE TTK*

---

### **Terminálisan védett cisztein tartalmú peptidek komplexképző sajátosságainak vizsgálata**

*Kulcsszavak: cisztein, peptid, potenciometria, kadmium, fotometria*

Ismert, hogy az enzimek fontos fémkötőhelye a cisztein aminosav egység, amely erős, reverzibilis kapcsolatot képes kialakítani különböző toxikus, illetve létfontosságú fémionokkal. A vizsgálataink során ezért kíváncsiak voltunk arra, hogy az Ac-Cys-Ser-Ser-Cys-NH<sub>2</sub>, illetve az Ac-Ser-Ala-Ala-Cys-NH<sub>2</sub> milyen komplexeket képez a toxikus karakterű kadmium(II)-, illetve az élőszervezetek számára esszenciális cink(II)ionokkal. Céljaink között szerepelt, hogy optimalizáljuk a körülményeket ahhoz, hogy az előbb említett fémkomplexek keletkezése követhető legyen UV spektrofotometriás módszerrel is. Ezt követően azt tanulmányoztuk, hogy milyen folyamatok játszódnak le az Ac-Cys-Ser-Ser-Cys-NH<sub>2</sub> ligandumot és nikkell(II)ionokat tartalmazó rendszerekben.



# **Környezeti kémia és környezettechnológia**



**IFJU ZSÓFIA**  
*ifjuzsofi@gmail.com*  
Vegyésmérnök  
BSc, 5. félév

Pannon Egyetem  
Mérnöki Kar

*Témavezető:*  
*Dr. Juzsakova Tatjana*  
*adjunktus, PE MK*

---

### **A vörösiszap katalizátorként történő alkalmazásának vizsgálata**

*Kulcsszavak: vörösiszap; másodnyersanyag forrás; HDO reakció; gvajakol*

Napjainkban egyre inkább előtérbe kerül a fenntartható fejlődés kérdésköre és azon belül a hulladékszegény technológiák kidolgozása és a racionális természeti erőforrás gazdálkodás. Az alumíniumipar egyik legnagyobb kihívása a termelés során keletkező vörösiszap hasznosítása. Napjainkra több mint, 2,7 milliárd tonna halmozódott fel belőle világszerte. Komplex ásványtani összetétele és magas vas-oxid tartalma miatt potenciális másodnyersanyag forrásunk. Számos lehetőséget vizsgáltak meg az elmúlt évtizedekben a vörösiszap hasznosítására, azonban gazdaságos megoldás eddig még nem született. Egy lehetőség a katalizátorként történő alkalmazása, a magas vas- és egyéb értékes fémtartalma miatt. Hidrogénezési, hidrokrakkolási reakcióban, vagy akár a Fischer-Tropsch szintézisben is potenciálisan alkalmazhatónak ígérkezik megfelelő előkezelést követően. A vörösiszap katalitikus reakcióban mutatott hatékonyságát modellmolekulák pl: a guiacol alkalmazásával vizsgáltam. A célom az volt, hogy a modellmolekulában található oxigén atomok eltávolítását kövessem nyomon a HDO reakció során, mielőtt komplex összetett bio-olajok tanulmányozását kezdeném. Az átalakulás mértékét a gázkromatográfiás mérési eredmények alapján határoztam meg.

A katalizátor egyik legfontosabb morfológiai jellemzője a fajlagos felület, amely különböző előkezelési módszerek révén növelhető. Savas előkezeléssel a Na- és Ca-tartalom mennyisége lecsökken, ezáltal nő a katalitikus aktivitás. A kísérletek során 110C°-on szárított vörösiszapon savas előkezelést alkalmaztam, ezt követően a kapott oldatot közel semleges pH értékűre állítottam be ammónia oldat felhasználásával, a hatékonyságvizsgálatának a céljából. Az áztatás után visszamaradt szűrletből ASS segítségével meghatároztam a mintából kimosott fémkomponenseknek a mennyiségét. A minta fajlagos felülete nitrogén adszorpciós méréssel határozható meg. A kezelt és kezeletlen minták ásványi és minőségi összetételét XRD analízissel hasonlítottam össze. A kapott eredményeket értékelve megállapítottam, hogy a vörösiszap előkezelés a HDO reakcióban mutatott hatékonyságot jelentősen megnövelte.

**FAZEKAS ÁKOS FERENC**

*fazekas.akos92@gmail.com*

Vegyész

MSc, 4. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Rózsa Georgina*

*PhD hallgató, SZTE TTIK*

*Schranz Krisztina*

*egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

---

**Az atrazin átalakítása kombinált UV/VUV fotolízissel: kinetika, köztitermékek, gazdaságosság**

*Kulcsszavak: atrazin; AOPs; UV/VUV; TOC; HPLC*

Napjaink egyik legfontosabb globális problémájának tekinthetjük a modern, növényvédő szereket alkalmazó mezőgazdaság környezet átalakító szerepét. A magas termésátlagokat produkáló gazdálkodás eredményeként egyes perzisztens peszticidek jelen vannak felszíni és ivóvizeinkben, így közvetlen kapcsolatba kerülhetünk ezekkel a toxikus molekulákkal. OTDK dolgozatom témája egy ilyen, a környezetben nagyon lassan átalakuló herbicidnek, az atrazin vizes oldatának oxidatív átalakítása vákuum-ultraibolya fotolízissel kombinált ultraibolya fotolízissel (UV/VUV). A módszer a nagyhatékonyságú oxidációs eljárások (angol nevén Advanced Oxidation Processes - AOPs) csoportjába tartozik és gyökgeneráláson alapul. A fotolízist  $1 \times 10^{-4}$ ,  $1 \times 10^{-5}$  és  $1 \times 10^{-6}$  M-os atrazin oldatokkal végeztem. Az atrazin átalakulását, illetve a köztitermékek kialakulását Agilent 1100-as típusú diódasoros UV-detektorral ellátott nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás (HPLC) készülékkel követtem. A kinetikai paramétereket a kezdeti sebességek módszerével határoztam meg. A képződött köztitermékek azonosítása LC/MSD VL típusú tömegspektrométerrel történt. Vizsgáltam továbbá az oldott oxigén hatását az atrazin átalakulására.

A fotolízis során az  $1 \times 10^{-4}$  M-es oldatok esetén nem volt eltérés az atrazin átalakulásában az oxigénnel telített és oxigénmentes körülmény között, ami arra utal, hogy mindkét esetben elsősorban direkt fotolízis játszódik le, amit az atrazin nagy moláris abszorpciós koefficiense tesz lehetővé. Teljes szerves széntartalom mérésével megállapítottam, hogy 180 perces UV/VUV fotolízis után is található még jelentős mennyiségű (40 %) szerves molekula az oldatban. Az UV, UV/VUV és VUV fotolízis energiahatékonyságát az EEO (Electrical Energy per Order) paraméter alapján hasonlítottam össze. Ilyen szempontból a leggazdaságosabbnak a kombinált UV/VUV módszer bizonyult, melyet az UV majd a VUV módszer követ.



**VARGA VERONIKA**  
vargavera92@gmail.com  
Vegyész  
MSc, 4. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem  
Természettudományi Kar

*Témavezető:  
Salma Imre  
egyetemi tanár, ELTE TTK*

---

## **Az ultrafinom aeroszol mérése és nukleációs forrásának jelentősége Budapesten**

*Kulcsszavak: ultrafinom aeroszol; diffúziós veszteség; nukleáció*

Az ultrafinom (UF) aeroszol részecskék ( $d < 100$  nm) jelentős éghajlati és egészségügyi hatással rendelkeznek. Vizsgálatuk differenciális mozgékonyaságon alapuló részecskeméret szeparátorral (DMPS) elvégezhető. A DMPS mérőrendszert egy bipoláris töltő, egy differenciális mobilitás analízátor, valamint egy kondenzációs részecskeszámláló (CPC) alkotja. Az UF részecskék főként diffúzióval szenvednek veszteséget. 2015 nyarán e veszteséget határoztuk meg. Elsőként két CPC-t mint detektorokat hasonlítottunk össze. A CPC2 és a DMPS összehasonlítása során azt tapasztaltuk, hogy a DMPS szisztematikusan kisebb koncentrációkat mér, mert a diffúziós veszteség nagyobb mértékű a DMPS rendszerben. A CPC/DMPS koncentrációk mediánját (1,22) tekintjük korrekciós tényezőnek.

Meghatároztam a nukleációs forrás jelentőségét is Budapesten egy éves hosszúságú (2014–2015) adatsor kiértékelésével. Kiszámoltam a nukleációs erősségi tényező (Nucleation Strength Factor, NSF) átlagos napi menetét a teljes évre és az évszakokra. Az NSF azt fejezi ki, hogy mekkora a nukleáció járuléka az UF részecskékhez az összes többi forráshoz (pl. emisszió) képest. A teljes évre az NSF számtani közepe 1,75, ami azt jelzi, hogy a nukleációs forrás jelentős mértékű. Az NSF átlagértékei tavasszal, nyáron és ősszel rendre 1,50, 1,34 és 1,83. Télen az NSF átlaga szokatlanul nagy érték, ami nem egyeztethető össze a nukleáció előfordulási gyakoriságával. Ezért minden évszakra meghatároztam az UF és regionális aeroszol (100–1000 nm) koncentrációjának átlagos napi menetét nukleációs és nemnukleációs napokra külön-külön. Az UF részecskék a helyi forrásokat jellemzik, élettartamuk max. egy óra, míg a 100–1000 nm átmérőjű részecskék az egész régióról szolgáltatnak információt. Tavasszal és nyáron a regionális aeroszol görbéje szinte teljesen átfed egymással nukleációs és nemnukleációs napokon. Ez alátámasztja azt a feltételezést, amelyet az NSF bevezetésekor alkalmaztak: nukleációs és nemnukleációs napokon a részecskeszám-koncentrációt meghatározó főbb folyamatok – a nukleációt kivéve – azonosak. Télen viszont ez a feltételezés nem érvényesült. Ez a források és nyelők versengő jellegével kapcsolatos. Az a tény, hogy télen mindössze 7 alkalommal történt nukleáció (a tavaszi 41 alkalommal szemben), felveti annak a kérdését, hogy ekkora esetszám elegendő-e reprezentatív átlagértékek kialakulásához. Eredményeim szerint ez nem elegendő, 15 körüli esetszám már kedvezőbb, és 20 feletti pedig biztonsággal megfelelő.

**VARGA KRISZTINA**

*vargakrisztina@ymail.com*

Környezettudomány

BSc, 6. félév

Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem

*Témavezető:*

*dr. Zsigmond Andreea-Rebeka*

*egyetemi adjunktus, RO EMTE*

---

### **Bükk-erdőből és Erdélyi-szigethegységből származó gombák összehasonlító elemanalízise**

*Kulcsszavak: elemanalízis; toxikus fémek; ehető gombák; fém akkumuláció*

Az ehető gombák közkedvelten fogyasztott élelmiszerek, amelyeket elsősorban sajátos aromájuk, alacsony kalóriatartalmuk és vitamintartalmuk miatt fogyasztanak. A gombákról köztudott, hogy könnyen akkumulálnak ásványi anyagokat, ezért a toxikus fémszennyezés indikátorai lehetnek. A Bükk-erdőből a kolozsvári lakosok előszeretettel gyűjtenek ehető gombákat. A kutatásunk céljaul tűztük ki ezeknek a gombáknak az elemösszetétel-meghatározását és egyben felmérni a gombák toxikus fém-szennyezettségének mértékét. Referencia területként választottuk az Erdélyi-szigethegység erdőit Pádis környékén és Boga-völgyében. Összesen 18 gombafajt és 3 talajmintát sikerült begyűjteni mindkét területről. Az elemösszetételt (összesen 20 elemet) külön vizsgáltuk a gombák tönkjében és kalapjában. A fajonként összehasonlított kalap és tönk elemösszetétele alapján kimutattuk, hogy 17 elem szignifikánsan nagyobb mennyiségben volt jelen a kalapban, mint a tönkben, ugyanakkor egyes fajok preferenciát mutattak bizonyos elemek iránt. Összehasonlítva a két területen nőt gombák elemösszetételét megállapítottuk, hogy Kolozsvár toxikus fém-szennyező hatása nem mutatkozik a Bükk-erdő gombáiban.

**KÁNTOR IZOLDA**

*kantorizolda@yahoo.com*

Környezettudomány

BSc, 6. félév

Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem

*Témavezető:*

*dr. Zsigmond Andreea-Rebeka*

*egyetemi adjunktus, RO EMTE*

---

**Erdély különböző településein termesztett spenót (*Spinacia oleracea* L.) összehasonlító  
nyomelem-analízise**

*Kulcsszavak: Spinacia oleracea L., nehézfém-szennyezés, elemösszetétel, kerti talaj, kockázati  
hányados*

Az emberre nézve toxikus fémekkel szennyezett vetemények fogyasztása veszélyt jelenthet egészségünkre nézve. Célul tűztük ki a Kolozsváron termesztett spenót elemösszetételének felmérését, és megállapítani, hogy fogyasztása kockázatot jelent-e az egészségre nézve. Összehasonlításként 3 települést választottunk ki. Kutatásunk során 34 spenót- és talajmintát elemeztünk: 11 kolozsvárit, 7 Magyargyerőmonostor-környéket (Kalotaszeg), 10 székelykeresztúrit és 6 csíkszentmártonit. Az adatfeldolgozást az R és Statistica 10 programcsomagok segítségével végeztük el. A többváltozós módszerek segítségével sikerült szétválasztanunk a négy település spenótmintáit 10 elem alapján, sőt a két nagyobb régió elkülönült az alkáliföldfém-koncentráció alapján. A toxikus fémek szempontjából a legnagyobb koncentrációkat a kolozsvári, míg a legkisebbeket a kalotaszegi talajokban mértük. A spenótmintákban az Pb- és Cd-koncentráció nem haladta meg a megengedett értékeket, ugyanakkor a különböző toxikus fémek kockázati hányadosai egyenél kisebb értéket mutattak. Az eredmények alapján elmondható, hogy a négy területről begyűjtött spenót fogyasztása a toxikus fémtartalom szempontjából biztonságosnak tekinthető.

**SOLYMOSI BENCE**  
*sb.antimon@gmail.com*  
Kémia  
BSc, 8. félév  
Pannon Egyetem  
Mérnöki Kar

*Témavezető:  
Dr. Fodor Lajos  
egyetemi adjunktus, PE MK*

---

### **Kén-hidrogén fotokatalitikus bontása fémszulfidokkal módosított ZnS/CdS félvezetőkön**

*Kulcsszavak: fotokatalízis; kénhidrogén-bontás; hidrogén-fejlesztés; CdS; ZnS*

A  $\text{H}_2\text{S}$  nagy mennyiségben fordul elő a nyers földgázban, és jelentős mennyiségben képződik a kőolaj feldolgozása során is. A kéntartalmú anyagok eltávolítása feltétlenül szükséges a tüzelőanyagokból, mivel azok akár közvetlenül, akár égéstermékeik révén erősen egészség- és környezetkárosító hatásúak.

A kénhidrogén feldolgozása jelenleg csaknem kizárólag a parciális oxidáción alapuló Claus-eljárás révén történik, amelyben a végtermék elemi kén mellett víz. Napjainkban egyre több kutatás irányul a  $\text{H}_2\text{S}$  heterogén fotokatalitikus bontására, amely során a nap energiáját felhasználva, víz helyett, energiatermelésre is használható hidrogén gázt nyerünk termékként. Munkám során a  $\text{H}_2\text{S}$  lúgos elnyeletése során keletkező alkáli-szulfid oldatok heterogén fotokatalitikus bontásával állítottam elő hidrogént. Katalizátorként kétféle módon előállított CdS-ZnS kompozitot használtam. Vizsgáltam a réz(II)-és ón(II)-szulfid módosító hatását. Mind a CuS, mind az SnS kedvezőtlenül befolyásolja a  $\text{H}_2$ -gáz előállításának hatékonyságát. A katalizátort minden esetben nemesfém segédkatalizátorral (Pd és/vagy Pt) vontam be, amelynek meghatároztam az optimális mennyiségét. A folyamatok jobb megértése érdekében kinetikai becslést végeztem, amelyhez különböző bontandó- és segédanyag-koncentráció mellett vizsgáltam a hidrogénfejlődés sebességét.

**NAGY EMESE**  
*naemese94@gmail.com*  
Környezettudomány  
BA, 6. félév

Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem

**TÓTH KRISZTINA**  
*kriszty\_75@yahoo.com*  
Környezettudomány  
BA, 6. félév

Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem

*Témavezető:  
Zsigmond Andreea-Rebeka  
egyetemi adjunktus, RO EMTE*

---

### **Közúti forgalom hatásának vizsgálata a pitypang (*Taraxacum officinale*) és talaj elemösszetételére**

*Kulcsszavak: közúti forgalom; pitypang; talaj; elemösszetétel*

A városi talaj számos antropogén hatásnak van kitéve, amelyek megváltoztathatják az elemösszetételét. Célul tűztük ki a kolozsvári közúti forgalom hatásának vizsgálatát a városi talajra és a városi környezetben Európa-szerte elterjedt pitypang (*Taraxacum officinale*) elemösszetételére. Ennek érdekében a hivatalos forgalmi adatok alapján négy mintavételi réteget határoztunk meg, valamint egy referencia területet a városon kívül. Minden rétegből a réteg összterületével arányos számú mintát vettünk a véletlen mintázás módszerével. Összesen 120 pontból gyűjtöttünk pitypang gyökér-, levél- és talajmintát 2015 őszén. A laboratóriumi feldolgozást követően a mintákban lévő elemek koncentrációját ICP-MS módszerrel határoztuk meg. Az adatokat statisztikailag dolgoztuk fel. Kimutattuk, hogy a forgalom csak néhány elem koncentrációjára (például Cd, Cu, Mn, Mo) van hatással a talajban. Ezek a hatások a pitypang gyökerének és levelének elemösszetételében is megmutatkoznak, de kisebb mértékben.

**VARGA KRISZTINA**  
*kriszti.varga823@gmail.com*

Középiskolai hallgató

Irinyi János Református Szakközépiskola és Diákotthon

*Témavezető:  
Farkasné Szabó Julianna  
középiskolai tanár, IJRSZK*

---

### **Technológiai vizek nitrofenol tartalmának csökkentése fizikai módszerekkel**

*Kulcsszavak: nitrofenol, technológiai víz, eltávolítás, adszorpció, extrakció*

Kutatási tevékenységem során bekapcsolódtam a Wanhua-BorsodChem Zrt. Technológiai Támogatás laboratóriumaiban folyó kutatás-fejlesztési munkákba. A vállalat gyártási folyamataiba új technológiai eljárás kerül majd bevezetésre az anilin előállítása, amely során nitrofenolokat is tartalmazó technológiai víz keletkezik.

Ezen vizek toxikusak, eleveniszapos bonthatóságuk 330 ppm alatti nitrofenol tartalom esetén lehetséges. Dolgozatom során ezért annak a tanulmányozását tűztem ki célul, hogy a technológiai vízből miként lehet fizikai módszerekkel a nitrofenol izomereket kinyerni. A nitrofenolok eltávolításának hatékonyságát UV-VIS spektrofotometriás és HPLC-s módszerekkel határoztam meg.

Fizikai eltávolítási műveletként adszorpciót és extrakciót alkalmaztam. Megállapítottam, hogy az aktív szentes adszorpció hatékonysága mindhárom nitrofenol esetén kielégítő, a módszer hátránya azonban az, hogy a szennyezett aktív szén reaktiválása költséges. Az extrakciós vizsgálatokhoz több szerves oldószert alkalmaztam. A vizsgált extrahálószer a különböző nitrofenol izomereket lényegesen különböző mértékben távolították el. Az aromás oldószerekkel – különösen a nitrobenzollal – végzett extrakció a legjobb eljárásnak bizonyult mind technológiai, mind gazdasági szempontból.

A vizsgálataim rámutattak arra, hogy fizikai módszerekkel a biológiai határérték-koncentráció alá csökkenthető a nitrofenol tartalom.

**VÁCZI VIOLETTA**

*violetta.vaczi@gmail.com*

Környezetmérnöki

MSc, 2. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezető:*

*Fejes Lászlóné Dr. Utasi Anett*

*adjunktus, PE MK*

---

## **Zirc város felszíni vízkészletének felmérése és értékelése környezetállapot-értékelést támogató mennyiségi módszerekkel**

*Kulcsszavak: vízminőség; IPG; Battelle; Cuha*

A környezetvédelmi eljárások szempontjából elengedhetetlen a környezet minőségének és állapotának meghatározása. 2015-ben a Környezetmérnöki Intézet készített egy kutatási jelentést Zirc város levegő- és vízminőségének állapotáról, melyben új mérési eredményeket hasonlított össze régebbi, 2006-ban és 2013-ban gyűjtött adatokkal. Az értékelést az Informatív Környezetminősítő Index módszer segítségével végezték. A jelentésben megállapították, hogy Zirc város levegőminősége a kiváló kategóriába tartozik, vízminőség tekintetében azonban további vizsgálatokat javasoltak, ugyanis az alkalmazott módszer használata során néhány paraméter esetén tapasztalt kiugró értékek oka nem határozható meg egyértelműen.

Ezek alapján feladatom, hogy az eddigi adatokat vízminőség szempontjából értékeljem két további környezetállapot-értékelést támogató mennyiségi módszer alkalmazásával, majd 2016 tavaszától kezdődően elvégezzem a javasolt vizsgálatokat, mintavételeket, feltérképezsem Zirc felszíni vízbázisát és újabb adatsort létrehozva összehasonlítsam a kutatási jelentés eredményeivel. Ezt követően megvizsgálom a várhatóan kiugró értékű adatok okát és felderítem, mennyire vannak hatással ezek a többi paraméterre.

Az ehhez választott mennyiségi módszereim a következők:

- Komplex Környezetszennyezési Index ( $I_{PG}$ ) módszer
- Battelle – féle környezetértékelési rendszer (KÉR).

Eddigi kutatásom során elsajátítottam a környezetállapot-értékelést támogató mennyiségi módszerek alapszintű alkalmazását, valamint kiértékeltem az eddig mért adatokat a fent említett két módszer segítségével, összehasonlítást végezve a mintavétel időpontját és helyét tekintve is.





## **Reakciókinetika és katalízis**



**ÖLVETI GÁBOR**

*olvetigabor@gmail.com*

Vegyésszmérnök

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:*

*Dr. Papp Gábor*

*tudományos főmunkatárs,*

*MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport*

---

**A cisz,mer-[IrH<sub>2</sub>Cl(mtppps)<sub>3</sub>] komplex előállítása és alkalmazása homogén katalitikus hangyasav bontásban**

*Kulcsszavak: Katalízis; Hidrogéntárolás; Hangyasav; Homogén katalitikus dehidrogénezés; Katalizátor*

A H<sub>2</sub>-gáz technológiában való felhasználásához elengedhetetlen a megfelelő módon történő tárolás megoldása. Másodlagos energiahordozóként üzemanyagcellákban elégetve villamos energia állítható elő. A hangyasav egy alternatív munkanyaga a hidrogéntárolásnak mivel homogénkatalitikus dehidrogénezése során H<sub>2</sub> és CO<sub>2</sub> 1:1 arányú elegyére bomlik. A hangyasav szelektív dehidrogénezése az alkalmazott kutatások egyik növekvő területe. Az irodalomban közölt nagy aktivitással rendelkező katalizátorok Ir, Rh, Ru alapúak.

A kutatócsoport munkatársaival együtt működve szintetizáltunk egy vízzoldható, egyszerű összetételű Ir alapú foszfin ligandumot (mtppps-Na) tartalmazó katalizátort, amely nagy aktivitást mutatott a vizes alapú homogénkatalitikus hangyasav bontásban. (TOF=298000 h<sup>-1</sup>). A komplex egyszerű előállíthatósága mellett nagy előnye, hogy a hangyasavat CO képződése nélkül bontja. Gáz-kromatográfiás vizsgálattal igazoltuk, hogy a CO tartalom 10 ppm alatti. Kísérleteink során vizsgáltuk fizikai és kémiai paraméterek hatását a bontás kinetikájára. Hőmérséklet függés vizsgálata során meghatároztuk a látszólagos aktiválási energiát. A szubsztrátum felesleg növelésével egy idő után nem érhetünk el jelentős bontási sebesség növekedést, a katalizátor koncentrációjának növelésével azonban a reakciósebesség jelentősen növelhető. A legmagasabb TOF érték pH=3,75-nél van, ahol a HCOOH/HCOO<sup>-</sup> aránya a rendszerben összemérhető. Zárt rendszerben nagy nyomású Parr®-reaktorban végzett kísérleteink során megállapítottuk, hogy a bontási folyamat még nagy nyomás ellenében is végbe megy. Stabilitásából a komplex nagy mennyiségű szubsztrátum felesleg hatására és 5 egymást követő töltési-kisütési ciklusban sem vesztett.

Összegzésként megállapítható, hogy az előállított cisz,mer-[IrH<sub>2</sub>Cl(mtppps)<sub>3</sub>] rendkívül kedvező tulajdonságokkal rendelkezik HCOOH-bontási reakciójában. Ugyanakkor a vizes közegű fémorganikus katalízis ezen formája hozzájárul a „zöld kémia” és a hidrogén alapú gazdaság fejlődéséhez.

**ANGYAL DÁVID**

*1994davids@gmail.com*

Kémia

BSc, 6. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezetők:*

*Szabó Mária*

*kutatóvegyész, DE TTK*

*Dr. Fábán István*

*tanszékvezető egyetemi tanár, DE TTK*

---

### **A glioxilsav oxidációja hipoklórossavval**

*Kulcsszavak: glioxilsav; formiátion; hipoklórossav*

Munkánk során a glioxilsav és hipoklórossav között lejátszódó reakciót vizsgáltuk savas közegben. Független kísérletekkel igazoltuk és alátámasztottuk, hogy a folyamat végterméke szubsztrát felesleg esetében a formiátion és kloridion, az oxidálószer nagy feleslege esetében pedig a szén-dioxid és a kloridion.

**NAGY IMRE ATTILA**

*nagy.imre.attila93@gmail.com*

Vegyésszmérnök

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:*

*Dr. Lente Gábor*

*egyetemi tanár, DE TTK*

---

### **Az etambutol reakciója hipokloritonnal: kinetika és mechanizmus**

*Kulcsszavak: spektrofotometria; stopped flow; pK meghatározás; koncentráció-függés; pH-függés*

A tuberkulózis (TBC, gümőkór) nagyon veszélyes, fertőző betegség. Elsősorban a tüdőben okozott gümökről kapta nevét. A történelem során az egyik legtöbb halálos áldozatot szedő betegség volt, ezért gyógyítására nagy erőfeszítéseket kell tenni. A betegség kezelése Magyarországon általában négy antibiotikum, az izoniazid, rifampicin, pirazinamid és az etambutol egyidejű használatával történik. A szervezet kórokozók elleni védekezése során - többek között - hipoklorit keletkezik, ezért lényeges annak megértése, hogyan lép reakcióba az antibiotikummal.

Munkám során spektrofotometriás és egyéb módszereket használtam a reakció létének igazolására, a kinetikai lépések vizsgálatára, valamint a termékek, köztitermékek meghatározására.

Az előkísérletekből igazoltam a reakció létét mind savas, közel semleges és lúgos pH-n is. A savas közegű mérések során stopped-flow technikát kellett alkalmaznom, mert gyorsan lezajló a reakció. Meghatároztam a kiindulási vegyület fluoreszcencia-spektrumát, valamint vizsgáltam a fotokatalízis lehetőségét is. Az eredmények alapján az etambutolnak van fluoreszcenciája, viszont az általam alkalmazott mérési körülmények mellett nincs fotokémiai reakcióra utaló jel. A termékek keletkezését <sup>1</sup>H-NMR módszerrel is igazoltam.

Sztöchiometriai vizsgálataim azt mutatják, hogy az etambutol és a hipoklorit közti reakciónak az első lépése nagyjából 1:2 arányúnak mondható, melyet vizsgáltam ESI-MS technikával is savas és lúgos tartományban egyaránt. A vizsgálat segítségével több terméknek is meg tudtam meghatározni összegképletét, s ez alapján szerkezeti képleteket is javasoltam.

Az etambutol pK-értékeit is meghatároztam sav-bázis titrálásos módszerrel, az irodalmi értékeknek megfelelő eredményt kaptam.

Savas közegben részletesen vizsgáltam a kinetikai folyamatokat. 1 - 2,5-ös pH tartományban vizsgáltam a reakció kezdeti sebességét különböző etambutol koncentráció mellett, Ezenkívül igazoltam, hogy a Cl<sup>-</sup>-ionok mennyisége nem befolyásolja a reakciósebességet.

**SIMON FRUZZSINA**

*simonfruzzi1202@gmail.com*

Kémia

BSc, 6. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezetők:*

*Szabó Mária*

*kutatóvegyész, DE TTK*

*Dr. Fábán István*

*tanszékvezető egyetemi tanár, DE TTK*

---

### **Az N-klór- $\alpha$ -alanin bomláskinetikája**

*Kulcsszavak: alanin; hipoklórossav; oxidáció; klóramin; reakciókinetika*

Munkánk során az  $\alpha$ -alanin és a hipoklórossav közötti reakcióban képződő N-klór- $\alpha$ -alanin bomlását vizsgáltuk.

A spektrofotometriás eredmények kiértékelése során arra a megállapításra jutottunk, hogy nagyobb hullámhosszakon az abszorbancia csökken, mely az MCA bomlásával magyarázható, míg kisebb hullámhosszakon nő az abszorbancia. Ez termékek képződésére utal.

A nagyobb hullámhosszakhoz tartozó kinetikai görbéket egy exponenciális összefüggéssel jól tudtuk illeszteni. Az így kapott sebességi együtthatók értéke azonos volt a különböző hullámhosszakon. Vizsgálatot végeztünk továbbá állandó N-klór- $\alpha$ -alanin koncentráció, de változó  $\alpha$ -alanin feleslegek alkalmazása mellett és arra a megállapításra jutottunk, hogy a bomlás sebessége független az  $\alpha$ -alanin koncentrációjától. A különböző pH-kon mért bomlási sebességi állandók értéke azonban erős pH-függést mutat.

<sup>1</sup>H-NMR kísérletekkel vizsgáltuk a reakció lefutását, valamint a jelek intenzitásának változását is követtük az idő függvényében. Sikerült megállapítanunk, hogy két termék képződik az MCA-bomlása során, melyből az egyik a piruvátion.

Független vizsgálatok arra utalnak, hogy az N-klór- $\alpha$ -alanin a feltételezett köztitermék acetaldehiddel reakcióba lép, s szintén a bomlás során kapott két terméket produkálja.

**NAGY ENIKŐ**

*nagyencsi6@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Fehér Klaudia*

*PhD hallgató, PE MK*

*Skodáné Dr. Földes Rita*

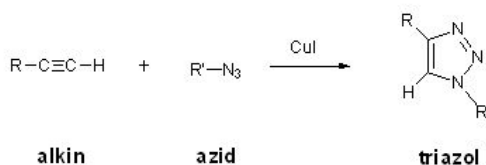
*egyetemi tanár, PE MK*

---

### **„Click” reakció tanulmányozása szilárd hordozóhoz rögzített katalizátor alkalmazásával**

*Kulcsszavak: katalizátor; azid-alkin cikloaddíció; hordozó; réz*

A „click” reakciók egy típusa, az azid-alkin cikloaddíció (AAC) enyhe reakciókörülmények mellett, nagy hozammal játszódik le, a réz katalizátor alkalmazásának köszönhetően (CuAAC) szelektíven vezet 1,4- diszubsztituált 1,2,3-triazolok képződéséhez. A katalizátor szilárd hordozóra rögzítése előnyt jelent a termék tisztítása, az újrafelhasználhatóság és ezáltal a gazdaságosság szempontjából.



Munkám során a heterogén CuAAC reakcióval foglalkoztam. Kutatásaim célja olyan hordozó kialakítása volt, amely lehetővé teszi a réz minél nagyobb mértékű megkötődését, így minimalizálva a lemosódást. Ennek érdekében polimerekkel módosított szilikagél hordozót állítottam elő, mely nagy mennyiségű imidazolil-csoportot tartalmazott. Ezen csoportok segítségével valósítottam meg a réz megkötését. Az így elkészített szilárd hordozóhoz rögzített réz-katalizátort használtam fel egy általam választott modellreakcióban. Vizsgáltam az átalakulás mértékét és az újrafelhasználhatóságot. Mindemellett további kísérleteket hajtottam végre, melyek során különböző oldószerek hatását, valamint a bázis elhagyásának reakcióra és réz-lemosódásra gyakorolt hatását derítettem fel. Az optimális körülmények meghatározását követően különböző kiindulási vegyületekkel hajtottam végre a cikloaddíciós reakciókat.

A folyamatok lejátszódását gázkromatográfiás módszerrel, illetve vékonyréteg-kromatográfiával követtem. Az előállított termékeket oszlopkromatográfiával tisztítottam, szerkezetüket NMR, GC-MS és IR spektroszkópia segítségével igazoltam.

AZ EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTERIUMA ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.

**NAJÓCZKI FERENC**  
*najoczki.ferenc1992@gmail.com*  
Vegyész, Analitikus szakirány  
MSc, 3. félév

Debreceni Egyetem  
Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:  
Dr. Bellér Gábor  
egyetemi adjunktus, DE TTK*

---

### **Heteroaromás N-oxidok előállítása**

*Kulcsszavak: oxon, N-oxidáció, savi disszociációs állandó, szubsztituenshatás, reakciókinetika*

Fenantrolin-mono-N-oxidok kinetikailag kontrollált előállítása és vizsgálata

Kutatómunkám során az 1,10-fenantrolin (phen) és a peroxomonoszulfát-ion (PMS) között lejátszódó redoxireakció kinetikai eredményeit használtuk fel preparatív célokra. Eljárást dolgoztunk ki a phen és szubsztituált származékainak mono-N-oxidációjára.

Savas körülmények között, közel sztöchiometrikus mennyiségű oxidálószer alkalmazva al-lítottunk elő jó hozammal mono-N-oxidokat, melyeket alapvető spektroszkópai módszerekkel (APCI-MS, <sup>1</sup>H-NMR, UV-Vis) jellemeztünk.

Aszimmetrikus származékból kiindulva izomer termékelegyeket kaptunk, melyek arányát <sup>1</sup>H-NMR módszerrel becsültük és elválasztásukra kísérletet tettünk HPLC technikával.

Többféle módszert alkalmazva (pH-potenciometria, UV-Vis spektrofotometriás titrálás, <sup>1</sup>H-NMR titrálás) meghatároztuk minden kiindulási anyag és szintetizált termék pK<sub>a</sub> értékét. A kapott eredmények kitűnően értelmezhetők a szubsztituensek elektronküldő és -szívó saját-ságaival. A mono-N-oxidok több nagyságrenddel (1,5-2,5 pK<sub>a</sub> egységgel) gyengébb savak a megfelelő kiindulási anyagnál, ami valószínűleg intramolekuláris hidrogénkötéssel és a deprotonálódásra való kisebb hajlammal magyarázható.

Vizsgáltuk a mono-N-oxidációs folyamatok kinetikáját, és meghatároztuk a másodrendű sebességi állandókat. Azt tapasztaltuk, hogy a sebességi állandók változásában elsősorban az elektrosztatikus kölcsönhatások a meghatározóak, de a 2,9-dimetil-származék esetében sztérikus gátlás is szerepet játszik.



**KOVÁCS MÁRTON**

*kmarci95@hotmail.com*

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Turányi Tamás*

*egyetemi tanár, ELTE TTK*

*Varga Tamás*

*PhD hallgató, ELTE TTK*

---

### **Hidrogén és nitrogén-oxidok égési rendszerekben való kölcsönhatását leíró reakciómechanizmusok vizsgálata**

*Kulcsszavak: égéskémia; reakciómechanizmus; érzékenységanalízis; szennyezőanyagok keletkezése; mechanizmusvizsgálat*

Az égés fontos folyamat az emberiség számára. Ahhoz, hogy az égetőberendezések működését környezetvédelmi és gazdasági szempontból is hatékonyra tudjuk tenni, ismernünk kell az égési folyamat pontos lejárásait. Az égések során nitrogén-oxidok ( $\text{NO}_x$ ) keletkeznek, és ezeknek sok káros környezeti hatásuk van, mint például a savas eső, az üvegház-hatás, és az ózonréteg bontása. A nitrogén-oxidok ugyanakkor gyorsíthatják is az égési folyamatokat (érzékenyítő hatás). Az égési rendszerek viselkedésének részletes leírása összetett reakciómechanizmusokon alapul. Összegyűjtöttünk hét, a közelmúltban közölt, a  $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{NO}_x$  égési rendszert leíró reakciómechanizmust. A munkám fő célja a kísérleti adatokat legjobban leíró mechanizmus kiválasztása volt. A  $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{NO}_x$  égési rendszerek kísérleti vizsgálatát főképpen lökéshullám-csőben és csőreaktorban végezték. Összesen 9 ilyen tárgyú cikket találtam az irodalomban, és ezekből 1354 mérési adatpontot használtam fel. A kísérleti eredményeket 91 XML-formátumú adatfile-ban kódoltam. A mechanizmusok vizsgálatát az ELTE Kémiai Intézet Reakciókinetikai Laboratóriuma által fejlesztett Optima++ programmal végeztem. A kísérleti körülmények széles tartományában vizsgáltam a mechanizmusokat, és a szimulációs eredményeknek a mérési adatokkal való összehasonlítása alapján meg tudtam állapítani, hogy mikor melyik a legpontosabb. Felállítottam egy végső sorrendet is a vizsgált mechanizmusok között: a legjobbnak a POLIMI-2014 mechanizmus bizonyult, ennél kicsit rosszabbak sorrendben a Klippenstein-2011 és a SanDiego-2014 mechanizmusok. A többi vizsgált reakciómechanizmus csak egyes körülményeknél adta vissza a mért adatokat. Lokális érzékenységanalízis segítségével minden mérési körülménynél kiválasztottam a legfontosabb elemi reakciókat. Összesen 10 ilyen elemi reakciót találtam:  $\text{N}_2\text{O} + \text{M} = \text{N}_2 + \text{O} + \text{M}$ ,  $\text{N}_2\text{O} + \text{H} = \text{N}_2 + \text{OH}$ ,  $\text{NO}_2 + \text{H}_2 = \text{HONO} + \text{H}$ ,  $\text{NH} + \text{NO} = \text{N}_2\text{O} + \text{H}$ ,  $\text{NO}_2 + \text{H} = \text{NO} + \text{OH}$ ,  $\text{NO} + \text{HO}_2 = \text{NO}_2 + \text{OH}$ ,  $\text{NO} + \text{O} + \text{M} = \text{NO}_2 + \text{M}$ ,  $\text{H} + \text{NO} + \text{M} = \text{HNO} + \text{M}$ ,  $\text{N}_2\text{O} + \text{O} = \text{N}_2 + \text{O}_2$ ,  $\text{N}_2\text{O} + \text{O} = 2 \text{ NO}$ . Ezen reakciók sebességi paramétereinek pontosításával egy hatékonyabb reakciómechanizmust lehet majd készíteni a  $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{NO}_x$  égési rendszer kinetikájának leírására.

**ADAMCSIK BERNADETT**

*adamcsik.detti@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Skodáné Dr. Földes Rita*

*egyetemi tanár, PE MK*

*Urbán Béla*

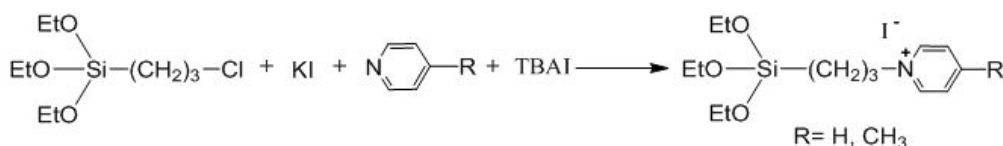
*PhD hallgató, PE MK*

---

## **Hordozóhoz kötött palládium-katalizátorok vizsgálata aminokarbonilezési reakciókban**

*Kulcsszavak: ionfolyadék; aminokarbonilezés; heterogén katalízis; palládium katalizátor*

Szakmai munkám során piridínium kationt tartalmazó ionfolyadékok előállításával és szilárd hordozóhoz való rögzítésével foglalkoztam. A kialakított ionfolyadék fázist kovalens módon kapcsoltam a hordozóként szolgáló szilikagél felületére. A megkötődött ionfolyadék segítségével immobilizáltam a palládium-vegyületet. Az így előállított SILP (Supported Ionic Liquid Phase) katalizátorokat palládium-katalizált reakciókban teszteltem jódbenzol és morfolin modellreakciójával.



1. ábra. Az ionfolyadékok előállítására alkalmazott módszer.

Meghatároztam a katalizátorok kezdeti palládium-tartalmát, majd ezt követően három és nyolc órás stabilitási vizsgálatokat végeztem. A továbbiakban higanymérgezéses kísérlet segítségével megállapítottam, hogy a reakció során a felületről leoldódó palládium nanorészecske vagy komplex formában van-e jelen a reakcióelegyben.

A katalizátorok vizsgálata során DMF mellett más oldószerekben, illetve más bázis alkalmazásával is végrehajtottam a modellreakciót, majd ezt követően a katalizátorokat jódbenzol-származékok, illetve alifás- és aromás aminok származékképzési reakcióiban alkalmaztam.

Spektroszkópiai vizsgálatok (NMR, IR) segítségével tanulmányoztam az ionfolyadékok megkötődését a szilikagél felületén. Az aminokarbonilezés során keletkező termékeket GC és GC-MS készülékekkel vizsgáltam, a katalizátorok kezdeti, illetve a reakció során leoldódó palládium tartalmát ICP-OES módszerrel állapítottam meg.

**FRIDRICH BALINT**

*fridrichbalint@gmail.com*

Gyógyszervegyész-mérőki mesterszak

MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Mika László Tamás*

*egyetemi docens, BME VBK*

---

### **Optikailag aktív gamma-valerolakton stabilitás vizsgálata és alkalmazása**

*Kulcsszavak: gamma-valerolakton, optikailag aktív, stabilitás, aszimmetrikus, biomassza*

Kutatómunkám során megvizsgáltam a biomassza eredetű hulladékok optikailag aktív gamma-valerolaktonná, mint javasolt királis platform molekulává történő átalakításának lehetőségét és az előállított termék kiralitáscentrumának stabilitását. Kísérleteim igazolták, hogy a korábban kidolgozott eljárások alapján D-fruktózból savkatalizált dehidratációval előállított levulinsavból 100%-os konverzióval, kemoszelektivitással és 78%-os enantiomertöbbslettel (*ee*) sikerült (*S*)-gamma-valerolaktont (GVL) előállítani, azaz a levulinsavban található esetleges szennyezők nem befolyásolják az alkalmazott katalizátor aktivitását és szelektivitását. További kísérlettel igazoltam, hogy nem ehető mezőgazdasági hulladékból (búzaszalma, napraforgóhéj stb. keveréke), azonos technológiával előállított majd vákuumdesztillációval tisztított levulinsavat szintén 100%-os kemoszelektivitással és 80%-os enantiomertöbbslettel (*ee*) lehetett (*S*)-gamma-valerolaktonná redukálni. Az optikailag aktív GVL további felhasználása (gyűrűnyitás/zárás) szempontjából kulcskérdés a molekula kiralitáscentrumának stabilitása. Az előbbiként előállított (*S*)-GVL sztereo centrumának stabilitását 1-13-mas pH- és 25-100 °C hőmérséklet tartományban vizsgáltam. A GVL gyűrű felnyílását majd visszazáródását <sup>18</sup>O izotópjelzéses technika segítségével igazoltam. Eredményeim szerint a vizsgált tartományban a GVL királis szénatomjának abszolút konfigurációja nem változott meg. A stabilitásvizsgálat után az optikailag aktív GVL felhasználásával előállítottam további két optikailag aktív vegyületet, amelyeknek szerkezetét NMR-el és/vagy királis állófázisú gázkromatográf segítségével igazoltam. A preparált ionos folyadék (tetrabutylammonium-(*S*)-4-hidroxivalerát [TBA](*S*)-[4HV]) királis reakció-közegként használható, míg a GVL további redukciójával nyert optikailag aktív 1,4-pentándiol (1,4-PDO) építőköként kerülhet felhasználásra további szerves kémiai szintézis sémákban. Továbbá bemutatom az optikailag aktív 1,4-PDO általunk alkalmazott szintézisének zöldkémiai szempontok alapján elvégzett elemzését.



## **Szerves kémia I.**



**NAGY SÁNDOR**

*nagys199@gmail.com*

Gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Hazai László*

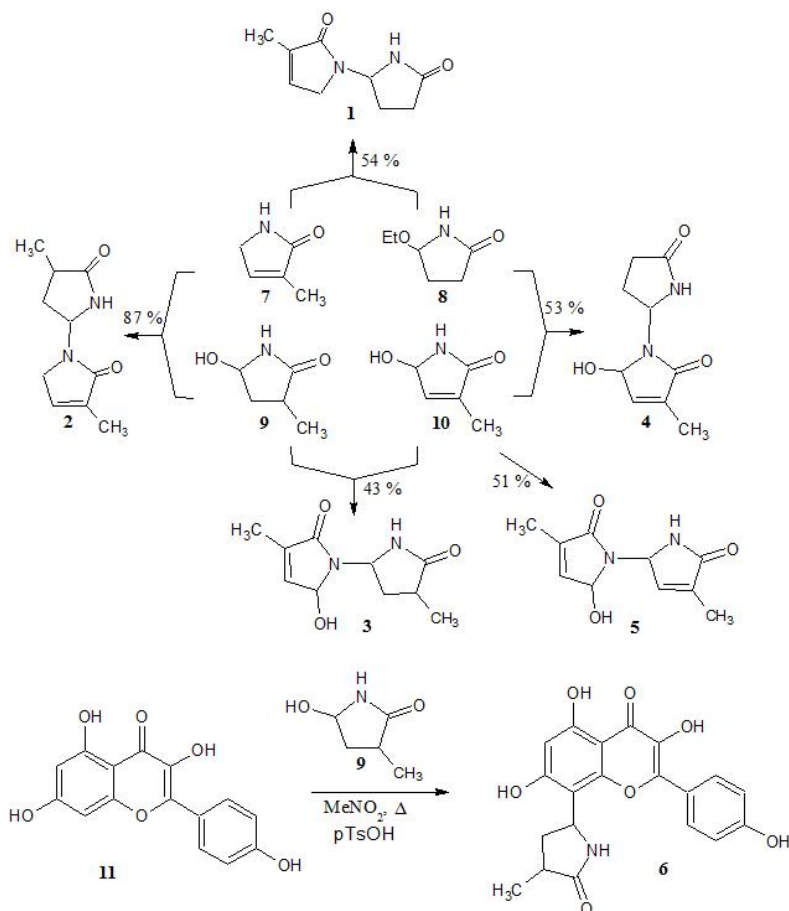
*egyetemi magántanár, BME VBK*

## A fehér liliom laktám-gyűrűt tartalmazó alkaloidjainak első szintézise

*Kulcsszavak: N-acilimínium ion; amidoalkilezés; lilium candidum; jatrofám; aminál funkció*

### A FEHÉR LILIOM LAKTÁM-GYŰRŰT TARTALMAZÓ ALKALOIDJAINAK ELSŐ, RACÉM SZINTÉZISE

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszékén működő Alkaloidkémiai Kutatócsoportban a legújabb kutatások során olyan *N*-acilimíniumionokon keresztül megvalósítható reakciókkal foglalkoznak, melyek célja a természetben is megtalálható *N* heterociklusos egységet tartalmazó alkaloidok előállítása. Munkám során megvalósítottam a fehér liliom (*Lilium candidum*) öt, aminál szerkezeti részt tartalmazó alkaloidjának (**1-5**) és egy flavonoid alkaloidjának, a lilalinnak (**6**) az első szintézisét.



KISS TAMÁS

ktoomi95@gmail.com

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Frank Éva

egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

Baji Ádám

PhD hallgató, SZTE TTIK

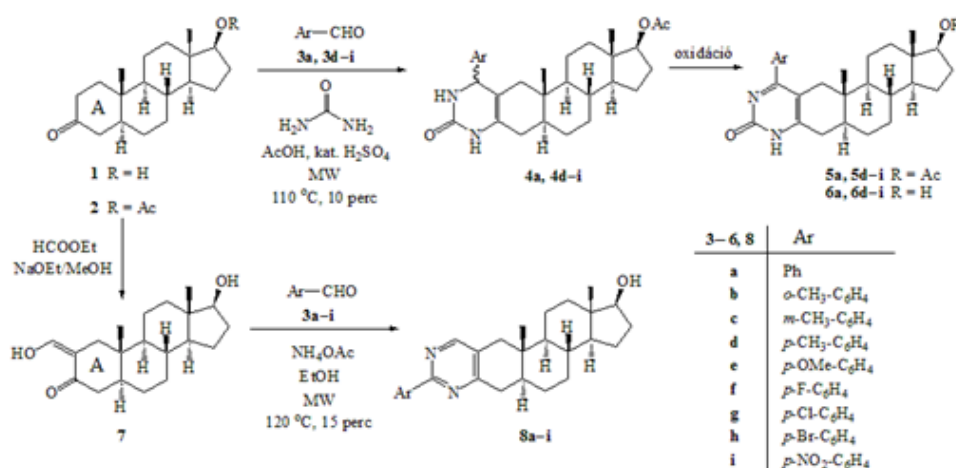
### Biológiailag aktív androsztánvázas arilpirimidinek multikomponensű szintézise mikrohullámú aktiválással

**Kulcsszavak:** dihidrotesztoszteron; pirimidin; multikomponensű reakció; mikrohullám; gyűrűzárás

A természetes nemi hormonokból (pl. dihidrotesztoszteron) félszintézissel előállított származékok az alapvegyülettől jelentősen eltérő biológiai aktivitást mutathatnak. A szerkezeti módosítások gyakori eszköze a különböző heterociklusok szteránvázba építése.

Munkánk során dihidrotesztoszteronból (1), és annak 2-hidroximetilidén származékából (7) kiindulva a váz A-gyűrűjéhez kondenzált különböző arilpirimidineket (5a, 5d-i és 6a, 6d-i, 8a-i) állítottunk elő kétfajta multikomponensű reakció segítségével. A szintéziseket mikrohullámú besugárzással, zárt reaktorban, poláris oldószerekben (AcOH, EtOH) végeztük. A reakciók az alkalmazott körülmények között 10-15 perc alatt lejátszódtak és a megfelelő termékeket közepes, illetve jó hozamokkal szolgáltatták. Az előállított vegyületek szerkezetét NMR-spektroszkópiával igazoltuk.

A heterociklusos származékok in vitro viabilitási vizsgálatát együttműködés keretében végezték, amely során a 8c és a 8f vegyületek biztató eredményeket mutattak.





**SIMON MÁRTON**

*simonmarton1@gmail.com*

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Kóczán György*

*tudományos segédmunkatárs, MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport*

*Hudecz Ferenc*

*egyetemi tanár, ELTE TTK*

*Sebestyén Mónika*

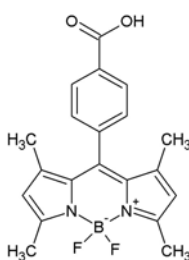
*Richter Gedeon Nyrt.*

---

## **Bór-dipirrometén szerkezeti egységet tartalmazó fluoreszcens jelzőmolekulák szintézise**

*Kulcsszavak: BODIPY; fluorofór; szintézisoptimalás*

A modern élettani vizsgáló eljárások többsége fluoreszcensen jelölt biomolekulákat használ, ezért fontos újabb fluoreszcens jelzőmolekulák szintézise. A szerves fluorofórok között sok szempontból kiemelkedő tulajdonságokkal bírnak a BODIPY szerkezetet tartalmazó molekulák: magas fluoreszcencia-intenzitás, érzéketlenség az oldószerre, jó oldhatóság, etc. [1, 2]. Munkám során a 4,4-difluor-8-[4-(karboxi)fenil]-1,5,3,7-tetrametil-3a,4a-diaza-4-bora-s-indacén (1) előállítását terveztem. A későbbiek során tervezem a molekula kapcsolását peptidekhez a karboxilcsoporton keresztül. Céлом volt az optimális szintézisút keresése, és az egyes reakciólépések optimalizálása. Az (1) vegyület az irodalomban ismert, de alacsony (12-14 %) kitermeléssel kapható [3, 4]. Igazoltam, hogy érdemes olyan reakcióutat választani, ami az (1) metilészterén, mint intermediéren keresztül halad, így könnyen tisztítható, kristályos terméket kapunk. A metilészter hidrolízisére az irodalomban leírtnál [5] magasabb (92% vs. 22%) termelést biztosító eljárást találtam. Összességében az általam javasolt úton (1) vegyület 43 %-os termeléssel, magas tisztasággal, jól méret növelhető módon állítható elő.



(1) vegyület

### **Irodalomjegyzék:**

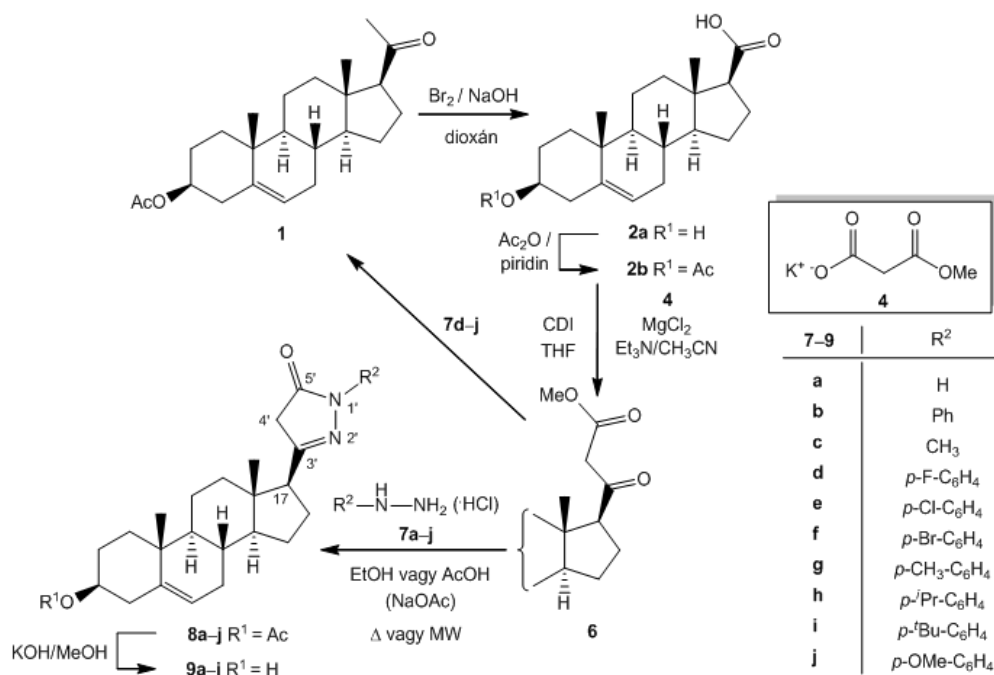
- [1] Boens N., Leen V., Dehaen W., Chem. Soc. Rev., 41, 1130-1172 (2012)
- [2] Loudet A., Burgess K., Chem. Rev., 107, 4891-4932 (2007)
- [3] Guo S., Zhang H., Huang L., Guo Z., Xiong G., Zhao J., Chem. Commun., 49 (77), 8689-8691 (2013)
- [4] Chauhan P., Yan N., RSC Advances, 6 (38), 32070-32073 (2016)
- [5] Bonacchi S., Montalti M., Prodi L., Zaccheroni N., Juris R., Genovesse D., Rampazzo E., EP2627360 A1, 2013 (szabadalo)

## Farmakológiailag aktív 17-exo-pirazolin-5'-onok mikrohullámú szintézise az androsztán sorban

**Kulcsszavak:** szteroid; 17-exo-heterociklus; pirazol-5'-on; mikrohullámú szintézis; antiproliferatív hatás

Az utóbbi években számos kutatás irányult a 17-exo-heterociklusos szteroidok előállítására. Egyes vegyületek az androgénfüggő betegségek terápiás szereiként, vagy szelektív tumor-antiproliferációs hatásuk révén kerülhetnek felhasználásra.

Kutatócsoportunk androsztánvázis 17-exo-pirazolin-5'-onok előállítását valósította meg. A szintézisekhez bromoform, és az azt követő acetilezési reakciók során kapott karbonsav (2b) lánchosszabbításával nyert  $\beta$ -ketoészter prekuzort (6) használtunk fel. A termékekhez a  $\beta$ -ketoészter és hidrazinok (7a-j) mikrohullámú melegítéssel megvalósított Knorr-típusú gyűrűzárási reakciói által jutottunk. Hidrazinnal (7a), fenil- (7b) és metilhidrazinnal (7c) a megfelelő heterociklusok (8a-c) kiváló hozamokkal képződtek, azonban a para-szubsztituált fenilhidrazin-hidrokloridokkal (7d-j) végzett átalakítások során pregnenolon-acetát (1) melléktermék képződése okozott hozamcsökkenést. A termékek (8a-j) és 3 $\beta$ -hidroxi analogonjaik (9a-j) közül néhány származék számottevő in vitro osztódás-gátlást mutatott egyes humán ráksejt vonalakon.



**FODOR ANNA ESZTER**

*annueszti@gmail.com*

Kémia

BSc, 9. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:*

*Kele Péter*

*tudományos főmunkatárs, MTA TTK SZKI*

---

### **Fluorogén azido-benzotiazol származékok szintézise**

*Kulcsszavak: bioortogonális, cikloaddíció, fluoreszcencia*

Kutatócsoportunkban olyan kétpontos kötődésre képes festék szintézisével foglalkoztunk, amely (AQBtz) kiemelkedő fluorogén tulajdonságai az aromás vázon jelenlévő két azid csoport együttes jelenlétének köszönhetőek. Célom volt az AQBtz két monoazid-származékának előállítása (6'-mAQBtz és 7-mAQBtz) és spektroszkópiai tulajdonságainak vizsgálata. A kísérleteim során választ kívántam kapni arra, hogy az előállított festékek rendelkeznek-e fluorogén jelleggel, illetve az azid csoportok milyen mértékben járulnak hozzá a fluoreszcencia kioltásához. Munkám során sikeresen előállítottam két monoazid fluorofórt. Ezek a festékek a biszazid festék (AQBtz) monoazid analógjai, melyekre azért volt szükség, hogy segítségükkel teljesebb képet kapjunk a biszazid-fluorogének működéséről, az azid csoportok fluorogenicitáshoz való hozzájárulásáról. A két előállított monoazid festék, szemben az AQBtz-vel, gyengén fluoreszcens. Az AQBtz szerkezetére specifikus bisz-ciklooktin peptiddel reagálva mindkét monoazid hasonló, 5 és 5,5 × fluoreszcencia-serkentést mutatott, szemben az AQBtz esetében mért 150-szeres értékkel. Ennek a nagy különbségnek az okai a következők lehetnek: az egyes azid csoportok körülbelül ugyanolyan mértékben járulnak hozzá a fluoreszcencia tompításához, de nem képesek a teljes fluoreszcencia-letörésre és a monoazidok szerkezetükből adódóan nem képeznek feszült peptid-festék ciklikus konjugátumot.

**BALOGH FANNY**

*fancsikab44@gmail.com*

Vegyésszmérnök

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezetők:*

*Prof. Dr. Borbás Anikó*

*tanszékezető egyetemi tanár, DE GYTK*

*Eszenyi Dániel*

*egyetemi tanársegéd, DE GYTK*

---

### **Gyökös mechanizmusú tioladdíciós reakciók hőmérsékletfüggésének vizsgálata**

*Kulcsszavak: tioladdíció; hőmérsékletfüggés; konfiguráció; 2-acetoxi-glikál; hűtés*

A dolgozatom elkészítése során, bekapcsolódva a tanszék munkájába, 2-acetoxi-glikálok és különböző tiolok fotoindukált reakcióit tanulmányoztam DPAP jelenlétében,  $\lambda = 365$  nm UV-besugárzás mellett. Vizsgálataim fő célja a reakciók oldószer-, koncentráció- és hőmérsékletfüggésének tanulmányozása volt.

2-Acetoxi-L-fukált reagáltattunk 2,3,4,6-tetra-O-acetil-1-tio- $\beta$ -D-glükopiranozával nem szabályozott hőmérsékleten, 0-5 °C-on, -40°C-on, valamint -80°C-on toluolban. Vizsgáltuk a reakció oldószerfüggését 0°C-on DKM-ban acetonban és toluolban. Majd pedig egy másik tiollal, 1,2:5,6-di-O-izopropilidén-3-tio- $\alpha$ -D-glükofuranózával is elvégeztük a reakciót szobahőmérsékleten és -80°C-on. S végül kísérletet tettünk 2-metilpropán-2-tiol addicionáltatására is 2-acetoxi-L-fukálra. 2-Acetoxi-D-galaktálra addicionáltattunk 1,2:3,4-di-O-izopropilidén-6-tio- $\alpha$ -D-galaktopiranozt szobahőmérsékleten és -80°C-on.

Vizsgálni kívántuk egy glükóz eredetű telítetlen cukor, a 2,3,4,6-tetra-O-acetil-1,5-anhidro-D-arabino-hex-1-enitol addíciós reakcióit is. Így 1,2-etánditiol-monoacetátot, 2-metilpropán-2-tiolt és tiofenolt próbáltunk -80°C-on addicionáltatni a telítetlen kötésekre.

Arra az eredményre jutottunk, hogy a telítetlen cukor konfigurációja jelentős mértékben befolyásolja a reakció kimenetelét. 2-Acetoxi-L-fukál és -D-galaktál esetében, reaktív tiolokkal jelentős mértékben javítható a konverzió hűtéssel a szobahőmérsékletű reakciókhoz viszonyítva. 2-Acetoxi- és 2-acetamido-D-glükál esetén reaktív tiolokkal végezve az addíciót, nem tapasztalható jelentős különbség a szobahőmérsékleten és hűtve végzett reakciók között. Kis reaktivitású tiolok esetén pedig a hűtés ront a konverziót, függetlenül a glikál konfigurációjától.

A jelenségek azzal magyarázhatóak, hogy a molekuláknak ahhoz, hogy C-gyök képződjön belőlük bizonyos aktiválási energiájú átmeneti állapotot kell keresztül menniük. Szobahőmérsékleten az acetoxi-fukál és -galaktál esetében, a rendszer rendelkezik annyi energiával, hogy ez a C-gyök visszaalakuljon a kiindulási vegyületté, míg acetoxi-glükál esetében nem. A fukál és galaktál esetében hűtés során lecsökken a rendszer energiája annyira, hogy a visszaalakulási folyamat ne tudjon lejátszódni, ezzel eltoljuk a reakciót a termék képződésének irányába. Nem reaktív tiolok addicionáltatása során tovább csökkentjük a reaktivitást a hűtéssel, ugyanis csökken a rendszer energiája, ezáltal nem tud elindulni a reakció.

## PETRÓ JÓZSEF LEVENTE

petrojozseflevente@gmail.com

Gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Tóth Tünde*

*egyetemi docens, BME VBK*

*Dr. Huszthy Péter*

*egyetemi tanár, BME VBK*

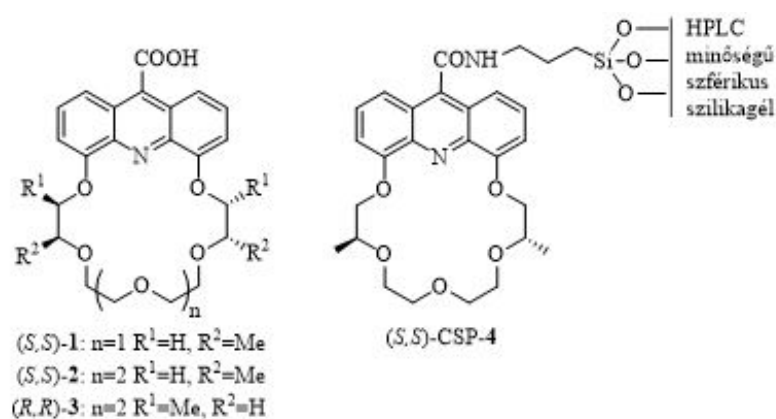
*Németh Tamás*

*doktorjelölt, BME VBK*

### Új, akridin egység tartalmú királis koronaéter alapú szelektorok szintézise és alkalmazása

*Kulcsszavak: makrociklusok; molekuláris felismerés; enantiomer-megkülönböztetés; HPLC; XRD*

Tudományos diákköri munkámat akridin egységet tartalmazó királis koronaéterek szintézise és alkalmazása témakörében végeztem. Az analóg vegyületekkel történő korábbi sikeres enantiomer-szeletivitási vizsgálatok eredményét figyelembe véve célul tűztem ki az (S,S)-1, az (S,S)-2 és az (R,R)-3, az akridin gyűrű 9-es helyzetében karboxilcsoportot tartalmazó, kiralitáscentrumaikon metilcsoportokkal rendelkező 18-korona-6-éter (n=1) valamint 21-korona-7-éter (n=2) típusú makrociklusok szintézisét. Az (S,S)-1 koronaétert kovalens kötésekkel szilikagélhez rögzítettem, és az így kapott királis állófázis [(S,S)-CSP-4] (Ábra) sikeresen választotta el HPLC-vel a racém [1-( $\alpha$ -naftil)etil]amin enantiomerjeit.



Ábra

## SZENTJÓBI HAJNALKA

hajni.szentjobi@gmail.com

Gyógyszervegyész-mérnöki mesterszak

MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Tóth Tünde*

*egyetemi docens, BME VBK*

*Dr. Huszthy Péter*

*egyetemi tanár, BME VBK*

*Szabó Tamás*

*K+F csoportvezető, doktorjelölt, SONEAS Vegyipari Kft.*

*Dr. Balogh György Tibor*

*címzetes egyetemi docens, osztályvezető, Richter Gedeon Nyrt.*

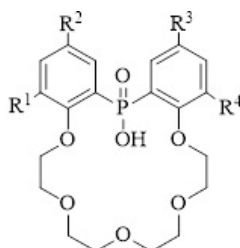
### Új diarilfoszfinsav egységet tartalmazó koronaéterek szintézise és a szubsztituensek hatásának vizsgálata a savi disszociációs állandókra

*Kulcsszavak: makrociklus; foszfinsav; pK<sub>a</sub> érték*

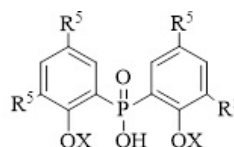
A deprotonálható koronaéterek képesek megvalósítani az ún. anion nélküli transzportot, mely során a koncentrációgradiens ellenében szállíthatnak fém, illetve ammóniumionokat. Ezen tulajdonságuk révén számos területen alkalmazzák őket. A transzportfolyamatokban a deprotonálható makrociklus ionokat jól, illetve rosszul komplexáló formáját legkönnyebben a közeg pH-jának változtatásával hozhatjuk létre reverzibilisen, ezért elengedhetetlen ismernünk a transzportot megvalósító ligandumok pK<sub>a</sub> értékeit.

Kutatócsoportunkban korábban vizsgálták a koronagyűrűn hosszú lipofil szénláncsal rendelkező, diarilfoszfinsav egységet tartalmazó, enantiomertiszta deprotonálható koronaéterek transzportfolyamatokban való alkalmazását. Munkám során ezen lipofil makrociklusok szerkezetével hasonló, de akirális koronaéterek előállítását valósítottam meg, ugyanis ezen makrociklusok pK<sub>a</sub> értékét a gyűrűhöz kapcsolódó lipofil szénlánc számottevően nem befolyásolja, azonban a gyűrűn szubsztituátlan koronaéterek pK<sub>a</sub> értékének mérését jelentősen megkönnyíti azok jobb vízoldékonysága.

Sikeresen szintetizáltam egy, az irodalomban korábban már ismert (1), illetve hat, korábban még nem közölt (2-7) diaril-foszfinsav egységet tartalmazó, deprotonálható koronaétert, ezen kívül előállítottam három a koronaéterekkel analóg szerkezetű diarilfoszfinsav-származékot (8-10) is. Ezen vegyületek pK<sub>a</sub> értékének meghatározása lehetővé tette az aromás gyűrűn lévő szubsztituensek, valamint a makrogyűrű jelenléte és a foszfinsav savassága közötti mélyebb összefüggések feltárását.



- 1: R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=R<sup>4</sup>=H
- 2: R<sup>1</sup>=H, R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=*t*Bu, R<sup>4</sup>=H
- 3: R<sup>1</sup>=NO<sub>2</sub>, R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=*t*Bu, R<sup>4</sup>=NO<sub>2</sub>
- 4: R<sup>1</sup>=H, R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=NO<sub>2</sub>, R<sup>4</sup>=H
- 5: R<sup>1</sup>=H, R<sup>2</sup>=NO<sub>2</sub>, R<sup>3</sup>=H, R<sup>4</sup>=H
- 6: R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=NO<sub>2</sub>, R<sup>4</sup>=H
- 7: R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=R<sup>4</sup>=NO<sub>2</sub>



- 8: R<sup>5</sup>=H, X=H
- 9: R<sup>5</sup>=H, X=CH<sub>3</sub>
- 10: R<sup>5</sup>=NO<sub>2</sub>, X=CH<sub>3</sub>

**TRIPOLSZKY ANNA**

*anna.tripolszky@gmail.com*

Gyógyszervegyész-mérnöki mesterszak

MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Bálint Erika*

*tudományos munkatárs, BME VBK*

*Dr. Keglevich György*

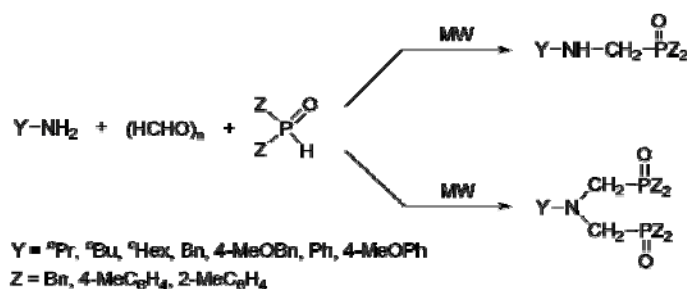
*egyetemi tanár, tanszékvezető, BME VBK*

## **$\alpha$ -AMINOFOSZFIN-OXIDOK SZINTÉZISE ÉS P-LIGANDUMKÉNT TÖRTÉNŐ FELHASZNÁLÁSA**

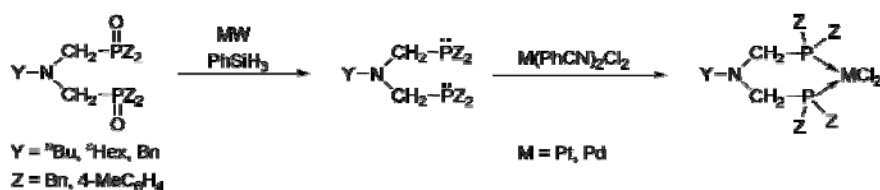
**Kulcsszavak:**  $\alpha$ -aminofoszfin-oxid; Kabachnik–Fields-reakció; mikrohullám; P-ligand; átmenetifém komplex

Napjainkban az  $\alpha$ -aminofoszfin-oxidok kutatási területe egyre inkább előtérbe kerül, melynek oka az  $\alpha$ -aminofoszfonát analógok potenciális bioaktivitása. Emellett bizonyos származékaik P(III)-ligandumként is felhasználhatók.

Kutatómunkánk során szekunder különböző foszfin-oxidokat állítottunk elő, majd a vegyületeket egyszeres és kétszeres Kabachnik–Fields-reakciókban hasznosítottuk. Míg az előbbi esetben a primer aminokat egy ekvivalens paraformaldehiddel és egy ekvivalens szekunder foszfin-oxiddal kondenzáltattuk, addig a kétszeres Kabachnik-Fields reakcióik során az aminokat kétszeres feleslegben vett paraformaldehiddel és P-reagenssel reagáltattuk. A kondenzációkat katalizátor nélkül, mikrohullámú körülmények között valósítottuk meg.



Tanulmányozni kívántuk a képződő bisz-termékek P-ligandumként való felhasználhatóságát, így a bisz(foszfinoilmetil)-aminokból kétszeres deoxigénezést követően, platina- és palládium-komplexeket képeztünk. A kapott gyűrűs platina-komplexek katalitikus aktivitását a sztirol hidroformilezési reakciójában teszteltük.







## **Szerves kémia II.**

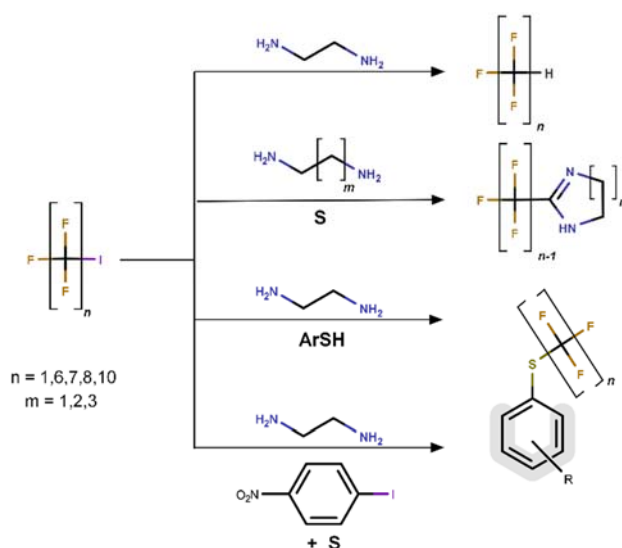


## 1-Jódperfluoralkánok redukciója és funkcionálizálása

*Kulcsszavak: fluor; fluorkémia; fluoros kémia; perfluoralkán; etilén-diamin*

Perfluoralkil-halogenidek 1H-perfluoralkánná történő alakítására számos módszer ismert. Ezek közül a legelterjedtebben használt a megfelelő perfluoralkil-jodidok báziskatalizált redukciója vagy elemi cinkkel történő redukálása metanolos közegben. Munkám során azt tapasztaltam, hogy a perfluoralkil-jodidok ( $\text{CF}_3(\text{CF}_2)_n\text{I}$ ,  $n = 5, 6, 7, 9$ ) etilén-diaminnal történő elegyítését követően az eleinte homogén oldatok idővel megzavarosodnak, majd szételegyednek két fázisra. A képződő alsó fázis tisztán tartalmazza a megfelelő 1H-perfluoralkánt.

- A reakciót több ponton optimalizálva hatékony módszert dolgoztam ki 1-jód-perfluoralkánok 1H-perfluoralkánná történő redukciójára etilén-diamin oldószerként és reagensként történő alkalmazásával társoldószer használata nélkül.
- Etilén-diaminban elemi ként oldva egy hatékony reagenst és egy eddig nem ismert reakciót fedeztem fel, mely során a kiindulási 1-jód-perfluoralkán egy  $\text{CF}_2$ -csoporttal rövidült s változatos tagszámú amidin típusú heterociklikus vegyületeket állítottam elő.
- Hatékony módszert dolgoztam ki tiofenolok trifluormetilezésére és perfluoralkilezésére etilén-diamin oldószer segítségével. Egyes esetekben a megfelelő aril-trifluormetil-szulfidokat kiváló termeléssel izoláltam.
- 4-Nitro-jódbenzolt etilén-diamin/kén reagenssel kitűnő termeléssel alakítottam 4-nitro-tiofenollá, illetve a tiofenolt izolálás nélkül, kaszkád reakcióban perfluoralkil-jodidok hozzáadásával a megfelelő 4-nitro-fenil-perfluoralkil szulfidokká alakítottam változatos termelésekkel.



**HENYECZ RÉKA**

reka422@gmail.com

Gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 10. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Keglevich György*  
*egyetemi tanár, BME VBK*

*Dr. Kiss Nóra Zsuzsa*  
*egyetemi adjunktus, BME VBK*

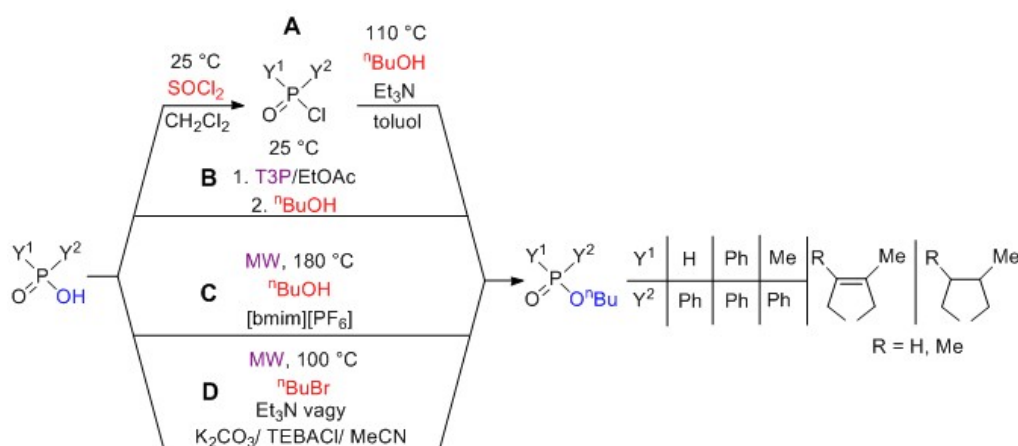
### Foszfínatok és foszfonátok előállítása észteresítési reakciókkal

**Kulcsszavak:** foszfinsav; foszfonsav-monoészter; T3P; O-alkilezés; direkt észteresítés

A foszfinsavak foszfínatokká történő közvetlen átalakítása fontos kutatási terület. Az elmúlt években környezetbarát módszerként a mikrohullámú (MW) körülmények között megvalósított direkt észteresítés és az alkilező észteresítés került kidolgozásra. [1]

Kutatómunkánk során egy új módszert fejlesztettünk ki foszfinsavak észteresítésére a T3P<sup>®</sup> reagens (ciklikus propilfoszfonsav-anhidrid) felhasználásával. Azt találtuk, hogy a foszfinsavak észteresítése ekvivalens T3P<sup>®</sup> jelenlétében enyhe körülmények között hatékonyan végbemegy. Továbbá, reakcióképes foszfinsavak észteresítése esetén kevesebb T3P<sup>®</sup> reagens is elegendő. A T3P<sup>®</sup> reagens használatát amidálásokra is kiterjesztettük.

A kidolgozott módszereket (A, B, C és D) esettanulmányokon keresztül hasonlítottuk össze. Értékeljük az egyes módszerek előnyeit és hátrányait, alkalmazhatósági körét, továbbá a reakciótípusokat zöld-kémiai mérőszámokkal is jellemeztük.



[1] Keglevich, G.; Kiss, N. Z.; Mucsi, Z.; Jablonkai, E.; Bálint, E. Green Proc. Synth. 2014, 3, 103.

**BOGNÁR ZSOLT**

*bognarzsolt94@gmail.com*

Vegyésmérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Faigl Ferenc*

*egyetemi tanár, BME VBK*

*Dr. Mátravölgyi Béla*

*tudományos munkatárs, BME VBK*

*Hergert Tamás*

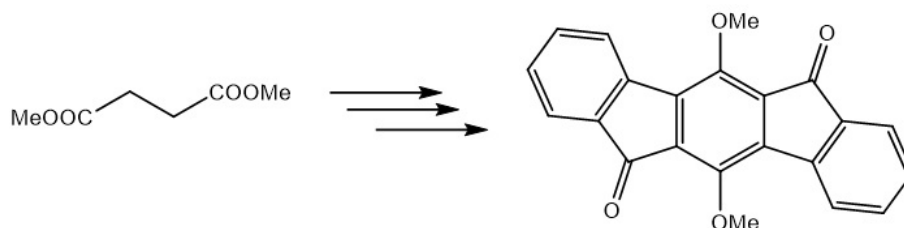
*PhD hallgató, BME VBK*

---

### **Indeno[1,2-b]fluorén-6,12-dion molekulaváz kialakításának vizsgálata**

*Kulcsszavak: szerves szintézis, szerves elektronika, színezék, policiklus,*

Tudományos diákköri munkámat Dr. Faigl Ferenc kutatócsoportjában végeztem, a BME Vegyésmérnöki és Biomérnöki Karának Szerves Kémia és Technológia Tanszékén. A téma, amelybe bekapcsolódtam, viszonylag újkeletű a csoporton belül, célja új, elektronikában potenciálisan felhasználható szerves festékanyagok előállítása, és tulajdonságaik vizsgálata. A policiklusos konjugált szénhidrogének (polycyclic conjugated hydrocarbon, PCH) világszerte számos kutatás tárgyát képezik. A gyakorlati szempontból hasznos származékok molekuláris felépítésére teljesül, hogy egy elektronszívó (akceptor) és egy elektronszolgáltató (donor) molekularészletet kiterjedt konjugált  $\pi$  rendszer köt össze, melynek köszönhetően a molekula sík szerkezetű. Erre vezethető vissza az a rendkívül előnyös tulajdonságuk, hogy könnyen gerjesztett állapotba hozhatóak, illetve hogy a molekulán belül az elektronok áramlása kis energiavesztéssel megvalósul (intramolecular charge transfer, ICT). Míg egészen a közelmúltig színezékeket elsősorban a textil-, műanyag, élelmiszer-, és építőiparban alkalmaztak, ezek a tulajdonságok lehetővé teszik a felhasználásukat olyan korszerű területeken, mint a szerves alapú elektronika és optika. A PCH-kat hasznosítani lehet tervezérlésű (OFET) tranzisztorok, fénykibocsátó diódák (OLED), fotovoltaiikus elemek (OPV), vagy akár fluoreszcens szenzorok építésénél. A PCH molekulákon belül az indeno[1,2-b]-fluorén (IF) származékok intenzív kutatás tárgyát képezik, mivel szintézisük olcsó, könnyen hozzáférhető anyagokból megvalósítható, és szerkezetük hasonló a lineáris acénekéhez, melyek szintén jól hasznosíthatóak kromofórként, például OFET tranzisztorokban. Ha az eredeti IF alapvázból diont képzünk, a molekula képes n-típusú félvezetőként viselkedni, továbbá nagyobb stabilitást mutat. A mi kutatócsoportunk célkitűzése a következő szintézis lépéseinek kidolgozása volt:



**HERBAY RÉKA**

*herbayreka@gmail.com*

Gyógyszervegyész-mérnöki

MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Bagi Péter*

*posztdoktor, BME VBK*

*Dr. Keglevich György*

*egyetemi tanár, BME VBK*

---

**P-Heterociklusos foszfin-boránok és foszfin-oxidok előállítása foszfóniumsó intermediereken keresztül**

*Kulcsszavak: Borán komplex; foszfolén-oxid; foszfóniumsó; alkoxi-foszfoniumsó; dinamikus rezolválás*

TDK munkám során irodalmi analógiák alapján megvalósítottuk foszfolén-boránok, illetve optikailag aktív foszfolén-oxidok előállítását foszfóniumsó intermediereken keresztül. A 3-foszfolén-oxidokat oxalil-kloriddal reagáltattuk, és így a megfelelő klór-foszfoniumsókhoz jutottunk, amelyeket ezután lítium-borohidriddel reagáltatva a megfelelő foszfolén-boránokat állítottuk elő, amelyek foszfolén prekursoroknak tekinthetők. Ezzel az eljárással tehát a foszfolén-oxidok deoxigénezésének és borán-komplex-képzésének praktikus „one-pot” eljárását dolgoztuk ki szilánok alkalmazása nélkül.

Az előállított gyűrűs klór-foszfoniumsók értékes intermedierek, ugyanis azokat királis alkoholokkal reagáltatva egymással diasztereomer viszonyban álló alkoxi-foszfoniumsók képződtek nem egyenlő arányban. Az alkoxi-foszfoniumsó diasztereomerek keverékét melegítve Arbuzov-reakcióban a várt optikailag aktív foszfolén-oxidot kaptuk, amit eddig rezolválással állítottak elő a kutatócsoportban.

## MOLNÁR BARNABÁS

barnabas.molnar@outlook.com

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Frank Éva

egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

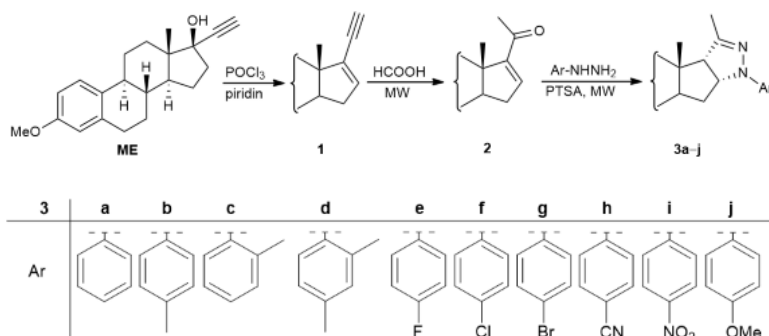
Mótyán Gergő

doktorjelölt, SZTE TTIK

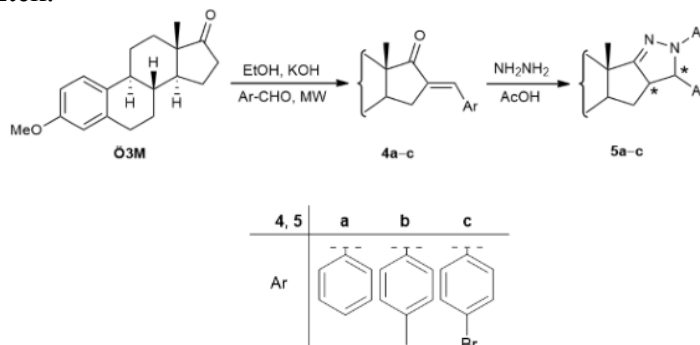
### Pirazolin-gyűrűvel módosított ösztron származékok előállítása mikrohullámú aktiválással

**Kulcsszavak:** szteroid; ösztéránváz; kondenzált heterociklus; arilpirazolin; mikrohullám

A Szteroidkémiai Kutatócsoportban végzett munkám során ösztéránváz D-gyűrűjéhez kondenzált pirazolin-származékokat állítottunk elő mikrohullámú technika alkalmazásával. A szintézisek egyik kiindulási anyagát (2) mesztranolból (ME) foszforoxi-kloridos dehidratációt követő hangyasavas kezeléssel kaptuk. Az enont (2) ezt követően savas közegben különféle p-szubsztituált arilhidrazinokkal reagáltattuk. A sztereoszелеktív gyűrűzárások 3a-j vegyületek jó hozamú képződéséhez vezettek.



Az ösztérón-3-metiléter (Ö3M) p-szubsztituált benzaldehidekkel végzett aldol-kondenzációs reakciójával ugyanakkor  $\alpha,\beta$ -telítetlen ketonokhoz (4a-c) jutottunk, melyeket hidrazin-hidráttal ciklizáltuk (5a-c). Utóbbi átalakítások a két új kiralitáscentrum létrejötte miatt diasztereomerek keverékét eredményezték.



A termékeket oszlopkromatográfiásan tisztítottuk, szerkezetüket <sup>1</sup>H- és <sup>13</sup>C-NMR mérések segítségével igazoltuk. A szintetizált anyagok farmakológiai vizsgálatára a későbbiekben kerül sor.

**ZWILLINGER MÁRTON**

*mrzwillinger@gmail.com*

Vegyész

MSc, 9. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Kotschy András*

*igazgató, Servier Kutatóintézet Zrt*

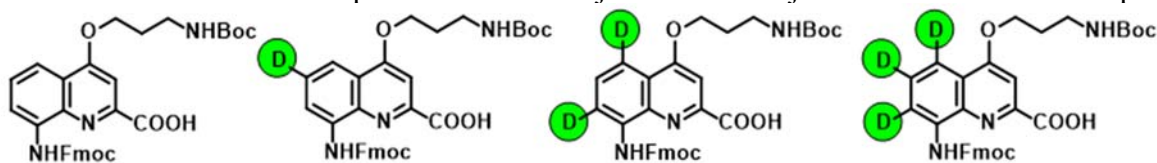
*Csékei Márton*

*kutató, Servier Kutatóintézet Zrt.*

### **Szelektíven deuterált heterociklusos foldamer építőelemek szintézise**

*Kulcsszavak: izotópjelölés, deutérium, kinolinváz, monomer, peptidmimetikum*

Az elmúlt két évtizedben a foldamerek számottevő érdeklődésre tettek szert a gyógyszerkutatás és az anyagtudomány területén. Előnyeik közé tartozik az enzimekkel szembeni stabilitás, jól tervezhető másodlagos szerkezet, hangolható hidrofilitás, irányított helicitás, illetve képesség szelektív kölcsönhatás kialakítására biológiai célpontokkal.[1,2] Az igény a foldamerek biológiai rendszerekben való tanulmányozására szükségessé tette a hatékony és gyors, nagy áteresztő képességű vizsgálati módszerek fejlesztését. Az ICPL (Isotope Coded Protein Labeling[3]) technikához hasonlóan lehetőségünk van izotópjelölt építőelemekből kombinatorikus szintézissel olyan foldamerek létrehozására, melyeknek szekvenciája izotóp tartalmuk által kódolt. Elméletileg, ha a jelölt foldamerek keverékét egy biológiai rendszerbe helyezzük, a célponthoz legjobban kötődő foldamerek komplexét elválaszthatjuk, majd a kiválasztott foldamereket nagy érzékenységű tömegspektrometriás módszerekkel vizsgálhatjuk. Az összetett tömegspektrometriás mérési adatok dekonvolúcióját és a szekvencia visszafejtését az izotópjelölés jelentősen egyszerűsítheti, ezzel gyorsabbá és hatékonyabbá teheti a foldamer keverékek vizsgálatát. Kutatásunk célja a fenti elv alkalmazhatóságának bizonyítása egy egyszerű modell rendszeren keresztül, melyben egy adott monomer különböző izotopomereit használjuk fel a jelölt foldamerek felépítéséhez.



Munkánk során sikerrel valósítottuk meg egy heterociklusos foldamer építőelem négy izotopomerének szintézisét több grammos tételekben. A reakciók kereskedelmi forgalomban kapható vegyszerekre épülnek. A deutérium beépítést kiváló szelektivitással és nagy hatékonysággal valósítottuk meg. A további átalakítások során erózió nem történt, a termékek minden esetben magas deutérium tartalommal rendelkeznek. Az előállított építőelemek foldamerekbe való beépítése folyamatban van. Az előzetes vizsgálatok alapján a foldamer szintézis során a deutérium tartalom nem csökken, így adott a lehetőség szelektíven izotópjelölt foldamerek előállítására és szekvenciájuk tömegspektrometriás dekonvolúciójának vizsgálatára.

Irodalom:

[1] Hill, D. J.; Mio, M. J.; Prince, R. B.; Hughes, T. S.; Moore, J. S.; Chem. Rev., 101, 3893-4012. (2001)

[2] Dawson, S. J.; Mészáros, Á.; Pethő, L.; Colombo, C.; Csékei, M.; Kotschy, A.; Huc, I.; Eur. J. Org. Chem., 20, 4265-4275 (2014)

[3] Kellermann, J.; Lottspeich, F.; Methods in Mol. Biol., 893, 143-153 (2012)



**BENKE ZSANETT AMÁLIA**

benke.zsanett91@gmail.com

Vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezető:*

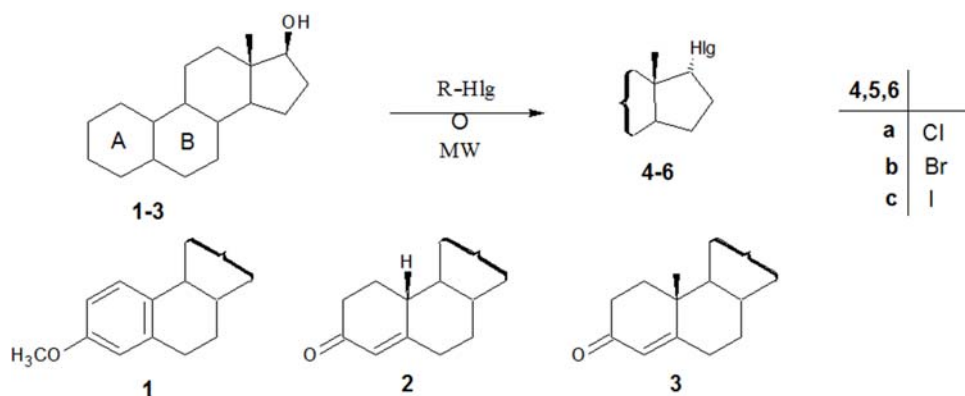
*Schneider Gyula*

*professor emeritus, SZTE TTIK*

### **Sztérikusan gátolt 17 $\beta$ -hidroxi szteroidok Mitsunobu reakcióval történő inverziós halogéncseréje mikrohullám alkalmazásával**

*Kulcsszavak: nor-tesztoszteron; tesztoszteron; ösztro-3-metiléter; Mitsunobu-típusú inverziós észterképzés; halogéncsere*

A Mitsunobu inverziós észterképzési reakció kísérleti körülményei között, alifás és aromás karbonsavak felhasználásával a 3 $\beta$ -, illetve 17 $\beta$ -hidroxi szteroidokból a megfelelő 3 $\alpha$ -, illetve 17 $\alpha$ -szteroid karbonsavészterek könnyen képződnek. Ezzel szemben a halogén atom inverzióval járó beépülése a 3 $\beta$ -hidroxi esetében igen, de a 17 $\beta$ -hidroxi szteroidok esetében csak nehezen következik be. A reakció elmaradása a 18 $\beta$ -metilcsoport erős térgátló hatásával értelmezhető [1]. A 17 $\alpha$ -halogén szteroid előállítására, amennyiben halogénforrásként könnyen ionizálódó szekunder alkil-halogenideket, benzil-halogenideket vagy mono-halogén-ecetsavésztereket választunk, úgy toluolos oldatban, 100oC hőmérsékleten, mikrohullámú reakció alkalmazásával az inverzióval történő halogén atom beépülése 5-30 perc alatt bekövetkezik. Az átalakulás nagy tisztaságban, jó nyeredéssel vezet a kívánt, többségében ismeretlen 17 $\alpha$ -halogén származékokhoz. Ilyen körülmények között a 3-metoxi-ösztro-1,3,5(10)-trién-17 $\beta$ -ol (1), az ösztro-4-én-3-on-17 $\beta$ -ol (2) az androszt-4-én-3-on-17 $\beta$ -olból (3) a megfelelő 17 $\alpha$ -klór- (4a-6a), 17 $\alpha$ -bróm- (4b-6b), és a 17 $\alpha$ -jód- (4c-6c) szteroid származékok képződnek:



Az ösztro-5 $\alpha$  klór származék antiproliferációs hatása a HeLa sejtekre (méhnyakrák) specifikus (IC<sub>50</sub>=1,2  $\mu$ M) és az egészséges sejtekre hatástalan [2,3].

1. O. Mitsunobu, Synthesis, 1981, 1.
2. R. Minorics, N. Bózsity, A. Gyovay, E. Mernyák, J. Wölfling, Gy. Schneider, I. Zupkó Int. J. of Molecular Medicine, 36, 112 (2015).
3. Gy. Schneider, A. Kiss, E. Mernyák, Zs. Benke, J. Wölfling, É. Frank, N. Bózsity, A. Gyovai, R. Minorics, I. Zupkó. Steroids, 105, 113 (2016)

**ZSIDÓ ERNA**

*ernazsido@gmail.com*

Klinikai Kémia

MSc, 2. félév

Babeş-Bolyai Tudományegyetem

*Témavezető:  
dr. Lovász Tamás  
adjunktus, RO BBTE*

---

### **Új fenotiazinil-vinil-piridínium színezékek előállítása és vizsgálata**

*Kulcsszavak: Fenil-fenotiazin; Suzuki kapcsolat; Knoevenagel kondenzáció; piridíniumsók; szerkezetvizsgálat.*

Az aril-fenotiazin-származékok jelentős alkalmazásokkal rendelkeznek: gyógyszerek, gyomirtók, vezető polimerek alapanyagai.<sup>1</sup> Aromás aldehideket elektronfogadó piridíniumsókkal kondenzáltatva különböző cianinszínezékek állíthatók elő, melyeket a molekuláris biológiában használnak.<sup>2</sup> Kutatásaink első felében Suzuki kapcsolási reakcióval fenil-fenotiazin származékokat állítottunk elő brómozott fenotiazin származékokból és fenil-boronsavból kiindulva. Ezt követően vizsgáltuk a 10-etil-7-fenil-10H-fenotiazin-3-karbaldehid Knoevenagel kondenzációját piridíniumsókkal, amely eredményeként fenotiazinil-vinil-piridínium színezékek keletkeztek.

Az így kapott új vegyületek szerkezetét és tulajdonságait: NMR, MS, IR és UV-VIS módszerekkel tanulmányoztuk.

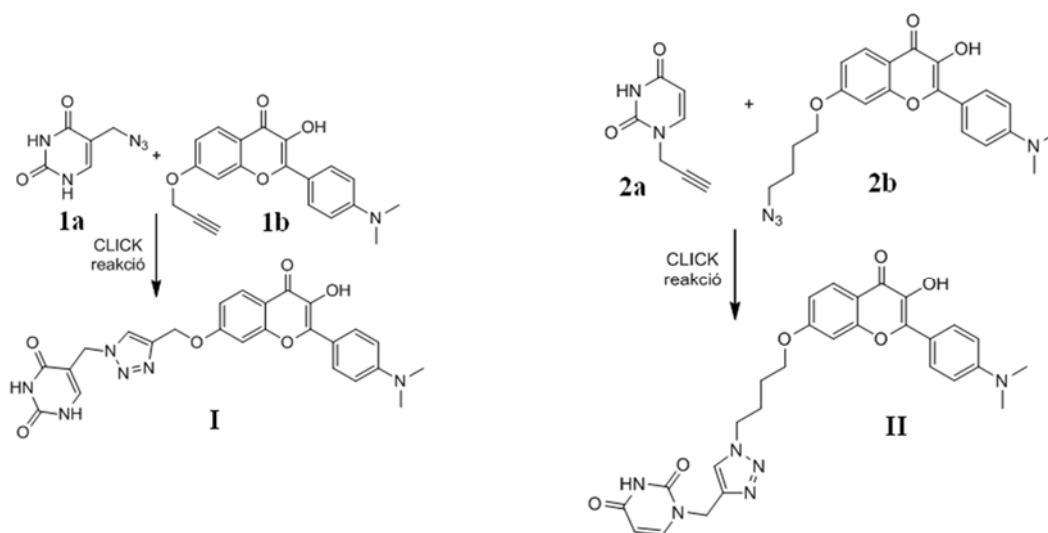
1. C. Sicre, A. A. C. Braga, F. Maseras, M. M. Cid, Tetrahedron, 2008, 64(30-31), 7437-7443.
2. L. Gaina, I. Torje, E. Gal, A. Lupan, C. Bischin, R. Silaghi-Dumitrescu, G. Damian, P. Lönnecke, C. Cristea, L. Silaghi-Dumitrescu, Dyes and Pigments, 2014, 103, 315-325

## Új típusú fluoreszcens nukleotidszenzorok szintézise és spektroszkópai vizsgálata

*Kulcsszavak: szupramolekuláris; kemoszensor; ESIPT; CLICK-reakció; molekuláris felismerés*

A 3-hidroxi-kromonok a gerjesztett állapotú belső protonátadás (excited state internal proton transfer, ESIPT) jelenségét mutatják, mely két emissziós sávot hoz létre ( $N^*$  és  $T^*$ ) a spektrumban. Ennek a tulajdonságnak köszönhetően hasznosnak bizonyulhatnak a fluoreszcenciás érzékelésben és leképezésben. Továbbá némely származékuk jelentős fluoreszcencia-választ mutat ATP (adenozin-5'-trifoszfát) hatására.

Kutatásunkban olyan új típusú nukleotid kemoszensorokat terveztünk, melyekben egy fluoreszcens 3-hidroxi-kromon egységhez egy nukleobázist kapcsoltunk, hogy kihasználva a komplementer bázispárok elvét, növeljük a vegyület szelektivitását és a komplexképzés erősségét. Előállítottuk az uracilt tartalmazó I és II molekulát az 5-azidometiluracil (1a) és a megfelelő propargiloxi-hidroxi-kromon vegyület (1b), valamint az N-propargiluracil (2a) és az azidobutil-hidroxi-kromon (2b) „click”-reakciójával.



Spektroszkópai vizsgálataink alapján I és II „turn-on” fluoreszcencia választ ad ATP és kisebb mértékben ADP (adenozin-5'-difoszfát) jelenlétében, míg GTP (guanozin-5'-trifoszfát), AMP (adenozin-5'-monofoszfát) és adenozin hatására nem észleltünk számottevő változást a spektrumban.



## **Szerves kémia III.**



**CSENKI JÁNOS TIVADAR**

*csejantivi@gmail.com*

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Novák Zoltán*

*egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

*Pethő Bálint*

*PhD-hallgató, ELTE TTK*

---

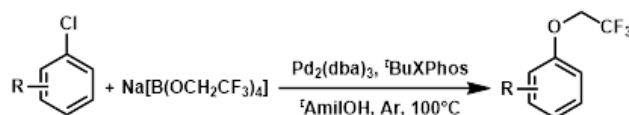
### **Aril-trifluoretil éterek előállítása palládium-katalizált keresztkapcsolási reakciókban**

*Kulcsszavak: trifluoretokilezés; borát só; aromás kloridok; heteroaromás kloridok*

A fluortartalmú vegyületek széles körben elterjedtek az anyagtudományban, az agrokémiában, valamint a gyógyszeriparban is. Ezt mutatja az is, hogy napjainkban a gyógyszermolekulák 20-25%-a tartalmaz fluort. Hatását elsősorban a metabolikus stabilitás és a biohasznosulás növelésében fejejt ki.

Fluortartalmú csoport aromás magba történő bevitelére egy lehetőség a trifluoretokilezés. Aril-trifluoretil éterek előállítására számos lehetőség kínálkozik a „klasszikus” nukleofil szubsztitúciótól kezdve, a réz segített vagy réz katalizált reakciókon keresztül, a palládium-katalizált keresztkapcsolásokig. Mindegyiknek vannak előnyei és hátrányai, mind árban, mind hatékonyságban.

Munkám során aromás, illetve heteroaromás klórszármazékokat alakítottam át palládium-katalizált keresztkapcsolási reakciókban borátsók segítségével aril-trifluoretil éterré. A kutatócsoport a korábbiakban kifejlesztett egy új típusú metokilező eljárást tetrametoxi borátsók felhasználásával. Ezt terjesztettük ki trifluoretokilezésre: optimaltunk a reakciót, teszteltük az alkalmazhatóságát.



Az új típusú trifluoretokilezési eljárás optimalt változata

Az ábrán látható módon a kiindulási aril-kloridot átalakítottuk nátrium tetrakis(2,2,2-trifluoretokxi)borát felhasználásával terc-amil alkohol oldószerben, 100°C-on, Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (tris(dibenzilidénacetone)dipalládium(0)) katalizátor és egy kereskedelmi forgalomban kapható foszfán-ligandum, a tBuXPhos mellett.

A kidolgozott eljárásról általánosságban elmondható, hogy elektronszívó csoportot tartalmazó szubsztitútm esetén a reakció könnyebben végbemegy, míg elektronszállító csoportot tartalmazó aril kloridok esetében, magasabb reakcióhőmérséklettel, illetve hosszabb reakcióidővel kell számolnunk a hatékony kapcsolás megvalósításához.

ANGYAL PÉTER

angyal.peter@ttk.mta.hu

Vegyésszmérnök

BSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:

Dr. Soós Tibor

igazgató, MTA TTK Szerves Kémiai Intézet

Varga Szilárd

tudományos munkatárs, MTA TTK Szerves Kémiai Intézet

Martin Gábor

vegyésszmérnök, MTA TTK Szerves Kémiai Intézet

Dr. Kupai József

egyetemi adjunktus, BME VBK

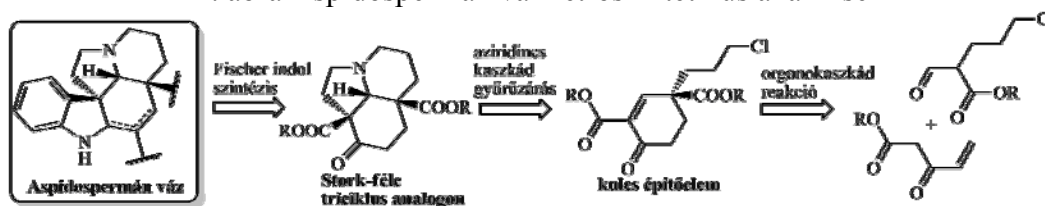
### Aspidospermán vázas indol alkaloidok organokatalitikus, divergens szintézise

*Kulcsszavak: totálszintézis; kaszkád reakciók; sztereoselektív; organokaszkád; preparatív*

Komplex, természetes vegyületek szintézisében egy újszerű és hatékony megoldás lehet az organokaszkád reakciók alkalmazása, segítségével erélyes körülmények és átmenetifémek használata nélkül valósíthatunk meg aszimmetrikus reakciókat.[1] Kutatócsoportunkban korábban olyan kinin alapú tiokarbamid, illetve négyzetsavamid katalizátorokat fejlesztettek, amelyek hatékonyak enantioszelektív és diasztereoselektív reakciók végrehajtásában.

Jelen munkánk során enantioszelektív, organokatalitikus Michael-aldol-kaszkád reakcióban állítottunk elő ciklohexén származék építőelemet. Ez az értékes vegyület – a megfelelő helyeken lévő funkciós csoportjainak köszönhetően – kiindulópontja lehet a pentaciklusos vázrendszeret tartalmazó Aspidospermán vázas indol alkaloidok divergens szintézisének.[2] Kulcslépéseink a váz kialakításában – az építőelem szintézisét követően – egy aziridinnel végrehajtott, gyűrűfeszültségét kihasználó kaszkád reakció, illetve a kapott tricikluson az indol részlet kialakító Fischer-féle indol szintézis [3] (1.ábra).

1. ábra Aspidospermán váz retroszintetikus analízise



A nagy hatékonyságú kaszkád reakciók segítségével – csupán néhány szintetikus lépéssel – grammos tételekben állítottuk elő a Stork-féle triciklus analogonját. A szintézis megtervezésénél fontos szempont volt, hogy a pentaciklusos intermedier számos alkaloid előállításához lehessen elágazási pont. Így több szerkezetileg részben eltérő Aspidospermán vázas vegyület szintézise valósítható meg.

[1] S. B. Jones, B. Simmons, A. Mastracchio, D. W. C. MacMillan; Nature, 2011, 475, 183–188.

[2] J. M. Lopchuk; Progress in Heterocyclic Chemistry, Vol 23 (eds: G. W. Gribble, J. A. Joule) Elsevier, Oxford, 2011, 1–25.

[3] G. Stork, J. E. Dolfini; J. Am. Chem. Soc., 1963, 85, 2872–2873



**WACHTLER ALEXANDRA**  
wachtler.alexandra@gmail.com  
Kémia  
BSc, 7. félév

Pannon Egyetem  
Mérnöki Kar

*Témavezetők:*  
*Skodáné Dr. Földes Rita*  
*egyetemi tanár, PE MK*  
*Fehér Csaba*  
*tanársegéd, PE MK*

---

### **Epoxi-szteroidok gyűrűnyitási reakcióinak vizsgálata hordozóhoz rögzített savas ionfolyadékkal**

*Kulcsszavak: szteroid; gyűrűnyitás; ionfolyadék; rögzített; epoxid*

A szteroidok fontos biológiai hatással rendelkező vegyületek. Egyes képviselőiket gyógyszerhatóanyagként vagy azok prekursoraiként használja fel az ipar. Szteránvázas epoxidokkal végzett reakciókban — a gyűrű helyzetétől és a hozzáadott reagenstől függően — különböző szubsztituenseket tartalmazó  $\beta$ -hidroxi-származékok nyerhetők.

Manapság nagyon elterjedt az ionfolyadékok alkalmazása szerves szintézisekben, mert az oldószer és a katalizátor szerepét egyaránt betölthetik. Nagy előnyük, hogy a reakció végén újra fel lehet őket használni. Korábban a Szerves Kémiai Intézeti Tanszéken már elvégezték epoxi-szteroidok gyűrűnyitását ionfolyadékban aminokkal [1] és tiolokkal [2] és jó hozammal nyerték a termékeket. Az ionfolyadékok kezelése azonban nagy viszkozitásuk miatt nehéz, a kevésbé poláris szteroidok nehezen oldódnak bennük. Katalitikus hatásukat akkor is kifejezhetik, ha hordozóra rögzítjük őket. Ekkor heterogén katalizátorként működhetnek.

Kutatásom során a 2 $\alpha$ ,3 $\alpha$ -epoxi-5 $\alpha$ -androsztán-17-on gyűrűnyitási reakcióit végeztem szilikagélhez rögzített Brønsted savas ionfolyadékkal, különböző alkohol és tiofenol reagensek jelenlétében. Vizsgáltam a reakció körülményeinek hatását. Megállapítottam, hogy a szteránvázas epoxidok gyűrűnyitási reakciójánál keletkező 'szabályos' termék mellett, más sztereoizomer is képződött. A termékek szerkezetét GC-MS és NMR-spektroszkópia segítségével határoztam meg.

[1] Horváth, A.; Skoda-F., R.; Mahó, S.; Berente, Z.; Kollár, L., Steroids, 2006, 71, 706–711.

[2] Horváth, A.; Frigyes, D.; Mahó, S.; Berente, Z.; Kollár, L.; Skoda-F., R., Synthesis, 2009, 23, 4037–4041.

**MAKSÓ LILLA**

*lillamakso89@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Skodáné Dr. Földes Rita*

*egyetemi tanár, PE MK*

*Szánti-Pintér Eszter*

*tanársegéd, PE MK*

---

### **Ionfolyadékok mint katalizátorok alkalmazása szteroidok reakcióiban**

*Kulcsszavak: szteroid; ionfolyadék; amin; aza-Michael-addíció*

Munkám célja olyan pregnánvázas szteroidok aza-Michael-adduktjainak előállítása volt, melyek kedvező biológiai hatással rendelkezhetnek.

A kívánt vegyületek szintéziséhez szerves oldószerek illetve külön katalizátor hozzáadása helyett bázikus ionfolyadékok alkalmazhatóságát próbáltam ki. Ezek az ionos vegyületek több előnyös tulajdonsággal is rendelkeznek. A reakció végeztével a termékek extrakcióval kinyerhetők belőlük, mivel nem elegyednek apoláros oldószerekkel, ezt követően könnyen újra felhasználhatók. További előnyük, hogy nagy a termikus stabilitásuk és nem korrozívak.

A reakcióim során olyan pregnánvázas szteroidokat használtam, amelyek  $\alpha,\beta$ -telítetlen keton molekularészt tartalmaztak. Elsőként morfolinnal reagáltattam őket bázikus ionfolyadék jelenlétében, argon atmoszféra alatt. A  $3\beta$ -hidroxipregna-5,16-dién-20-on bizonyult megfelelő kiindulási szteroidnak, így a továbbiakban ezt a vegyületet használtam.

Az optimális reakciókörülmények meghatározása után különböző primer és szekunder aminok addícióját vizsgáltam, a termékeket jó és kiváló hozammal izoláltam. Ezek közül legmagasabb hozammal a morfolinaza-Michael-addíciójából származó terméket sikerült előállítani. Ez esetben az ionfolyadék további négy körön keresztül hatékonyan újrafelhasználható volt.

A reakciók lejátszódását vékonyréteg-kromatográfiával és gázkromatográfiával követtem. A kapott vegyületeket  $^1\text{H-NMR}$ ,  $^{13}\text{C-NMR}$  és infravörös spektroszkópiával, valamint tömegspektrometria segítségével azonosítottam. Egy termék szerkezetét röntgendiffrakciós méréssel is bizonyítottam. Az előállított vegyületek biológiai aktivitásának vizsgálatát is célul tűztem ki, így átadtam őket a  $\text{C}_{17,20}$ -liáz enzim gátlásának mérésére. Az ilyen enzimgátló szteroidok alkalmasak lehetnek androgénfüggő megbetegedések kezelésére. Több általam előállított származék is hatékonynak bizonyult a  $\text{C}_{17,20}$ -liáz enzim inhibitoraként.

**RÓZSÁR DÁNIEL**

danielrozsar@gmail.com

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Wölfling János*

*egyetemi tanár, SZTE TTIK*

*Balázs Árpád*

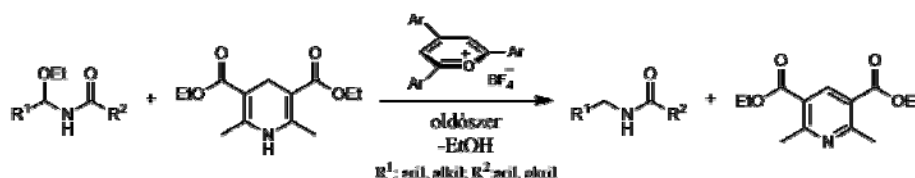
*tudományos főmunkatárs, Avicor Kft.*

---

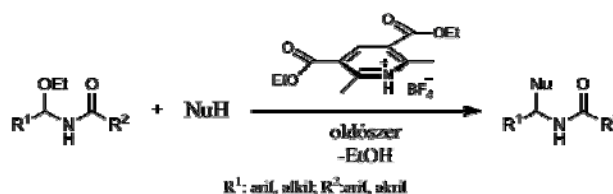
### N-Acil-N,O-acetálok új típusú katalitikus átalakításai

**Kulcsszavak:** organokatalízis; Hantzsch-észter; N-acilimin; pirílium-só; elimináció-addíció

Munkánk során egy új, N-acil-N,O-acetálokon lejátszódó organokatalitikus, pirílium-sókon és Hantzsch-észteren alapuló redoxireakciót vizsgáltunk.



A reakciót optimalizáltuk, majd részletesen elemeztük a folyamat mechanizmusát, gyökös, illetve ionos részlépéseit. Ennek során megállapítottuk, hogy a katalízist végző molekula egy, az általunk alkalmazott reakciókörülmények között in situ képződő Brønsted sav, amely szintézisét sikeresen elvégeztük. Az N-acil-N,O-acetálokból képződő intermedier (N-acilimin) előállításával és vizsgálatával alátámasztottuk a reakció mechanizmusára tett javaslatainkat. A feltárt mechanizmus alapján további átalakításokat terveztünk, amelyek segítségével sikeresen alakítottunk ki új C-H, C-O, C-N, illetve C-C kötések az általunk előállított kiindulási anyagokon.



A pirílium-sók és Hantzsch-észter eddig nem ismert gyökös reakcióját elektronspin rezonancia spektroszkópiai kísérletekkel, spincsapdázó és gyökfogó vegyületek alkalmazásával jellemeztük

**GOMBKÖTŐ DÁNIEL**

*gombkoto.daniel@gmail.com*

Vegyész

MSc, 2. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezető:*

*Dr. Szöllősi György*

*tudományos főmunkatárs, SZTE TTIK*

---

## **Oxidok felületén végrehajtott prolinnal katalizált heterogén enantioszelektív Michael-addíció**

*Kulcsszavak: heterogén, aszimmetrikus, katalízis, Michael-addíció, prolin*

A vegyipar számos területén, különösen a gyógyszeriparban fontos az optikailag tiszta vegyületek előállítása, hiszen egy vegyület sztereoizomereinek farmakológiai hatása eltérő lehet. Ennek köszönhetően az utóbbi időben rendkívüli figyelmet kapnak az aszimmetrikus katalitikus módszerek felfedezésére irányuló kutatások. A környezetvédelmi előírások és a fenntartható fejlődés előtérbe helyezése heterogén katalizátorok használatára készíti az ipar több területét. Ezek alapján munkám célja új királis heterogén katalizátor kifejlesztése volt egy ismert aszimmetrikus Michael-addíciónak az enantioszelektív kivitelezésére. Tesztreakcióként butanal addícióját választottam transz-b-nitrosztírolra, és erre a célra olyan heterogén katalizátort kerestem, amely könnyen hozzáférhető, olcsó, könnyen előállítható illetve újrahasználható, és amellyel jó sztereoszelektivitás érhető el ebben a reakcióban.

Az irodalmi előzmények alapján választott prolin katalizátort rögzítettem számos szervetlen oxid felületére, majd a jellemzett heterogén katalizátort alkalmaztam a választott enantioszelektív 1,4-addícióban. A leghatásosabb szilárd anyagnak a laponit bizonyult, amely használatával jóval nagyobb sztereoszelektivitás érhető el a homogén fázisú reakcióhoz képest. A reakcióparaméterek vizsgálatát követően a felületen rögzített királis katalizátorral sikerült megközelíteni az irodalomban leírt bonyolult, több szintetikus lépésen keresztül előállított katalizátorral elért eredményeket. Összegzésként kiemelhető, hogy sikerült előállítani egy királis heterogén katalizátort, amely jó hatásfokkal működött, egyszerűen újrahasználható, valamint olcsó és könnyen hozzáférhető. A kifejlesztett heterogén királis katalizátor lehetővé teszi olyan addíciós termék előállítását nagy enantioszelektivitással, amelynek redukciójával gyakorlati jelentőségű optikailag dúsított N-heterociklusos vegyületek állíthatók elő.

**SÁLYI GERGŐ**

*salyigergo94@gmail.com*

Kémia

BSc, 7. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Novák Zoltán*

*habil. egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

*Tóth Balázs*

*PhD hallgató, ELTE TTK*

---

### **Palládium-katalizált C-H aktiválás: anilidek orto-helyzetű 2,2,2-trifluoretilezési reakciója**

*Kulcsszavak: átmenetifém-katalízis; irányított C-H aktiválás; acetanilidek; jodónium sók; fluortartalmú funkciós csoportok*

A modern szintetikus szerves kémia kiemelt szereplői az átmenetifém-katalizált átalakítások. Segítségükkel lehetőség nyílik molekuláriszletek hatékony módosítására, kapcsolására, így új vegyületek előállítására, vagy a célvegyületekhez vezető szintetikus út lerövidítésére. A szerves vegyületek szén-hidrogén kötéseire (C-H) általánosságban az inertség jellemző, azonban egyes átmenetifémek, mint például a palládium, enyhe reakciókörülmények között képes a C-H kötés hasítására, aktiválására, ami katalitikus ciklusok részeként átalakítások széles körét teszi lehetővé. A fluortartalmú csoportok jól használhatók bioaktív molekulák kémiai és fizikai tulajdonságainak finomhangolásához. Beépítésük sokszor nagy reaktivitású reagensek, mint például a jód magasabb oxidációs állapotait tartalmazó hipervalens jódvegyületek segítségével történik. Tudományos diákköri munkám során egy, a három tématerületet átfogó új átalakítás kifejlesztésében vettem részt. Anilid származékok orto-helyzetű 2,2,2-trifluoretilezését valósítottam meg palládium-katalizált irányított C-H aktiváláson át. Reagensként a kutatócsoportban már eredményesen alkalmazott 2,2,2-trifluoretil-mezitil-jodónium-trifluormetánszulfonát sót használtam. A reakció trifluorecetsav adalék mellett, diklórmétán oldószerben, szobahőmérsékleten, néhány óra alatt enyhe körülmények közt teszi lehetővé az átalakítást.

Munkám során vizsgáltam és optimalizáltam reakció körülményeit. Előállítottam a reakció kiindulási anyagait, így acetanilideket, egyéb karbonsavanilideket, és a jodónium sót. Megvizsgáltam a reakció kiterjeszthetőségét több mint 50 lehetséges szubsztráton, majd az optimalizált körülmények között előállítottam 4 új, eddig nem leírt orto-trifluoretilezett terméket.

Kutatótársaimmal együtt a kifejlesztett reakcióban összesen 43, eddig nem ismert vegyületet izoláltunk jó és kiváló termelésekkel.[1] Az átalakítás további alkalmazhatóságát a kutatócsoport aromás karbamidszármazékokon is bemutatta, melynek eredményeként kutatócsoportunkban 34 további trifluoretil származékot sikerült előállítani.[2]

[1] Tóth, B. L.; Kovács, S.; Sályi, G.; Novák, Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, 55, 1988–1992.

[2] Kovács S.; Tóth, B. L.; Borsik, G.; Bihari, T.; May, N. V.; Stirling, A.; Novák, Z. *Adv. Synth. Catal.*, közlésre elfogadva DOI 10.1002/adsc.201601136

**ELEKES PÉTER**

*pet.elekes@gmail.com*

Vegyész

MSc, 11. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Novák Zoltán*

*egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

*Simkó Dániel*

*PhD hallgató, ELTE TTK*

---

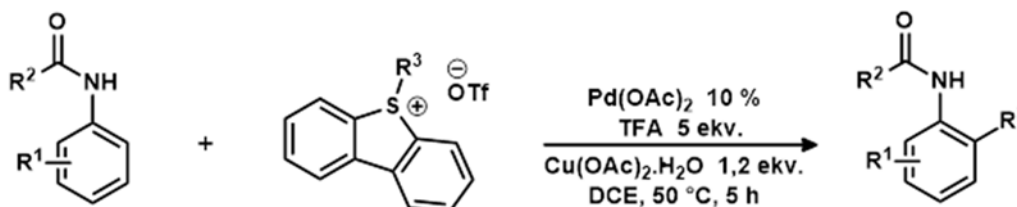
### **S-alkil-dibenzotiofén-származékok szintézise és alkalmazása palládium-katalizált C-H aktiválási reakciókban**

*Kulcsszavak: Szulfóniumsó; palládium-katalizált C-H aktiválás; C-H aktiválás; alkilezés*

A palládium-katalizált C-H aktiválási reakciók a szintetikus kutatások egyik aktuális és gyorsan fejlődő területe. Ezáltal egyszerűbb és gyorsabb utat nyithatunk új szén-szén kötések kialakítására más, klasszikus módszerekhez képest. A C-H aktiváláson keresztül megvalósított alkilezésre eddig kevés példa szerepel az irodalomban. A téma másik érdekességét adja a szulfónium sók új területen való alkalmazása is.

Az acetanilidek szerkezeti elemként fontos szerepet játszanak a szintetikus szerves kémiában és számos gyógyszeripari hatóanyagban jelenik meg, mint építőelem.

Dolgozatom céljának C-H aktiválási reakcióban új alkilezőszernek számító, alkilezett dibenzotiofén-sók előállítását és palládium-katalizált C-H aktiválási reakciókban való alkalmazhatóságának vizsgálatát tűztem ki célul.



Kutatómunkám során kifejlesztett, dibenzotiofén-sókkal megvalósított C-H aktiválási módszerrel számos acetanilid-származék orto-alkilezése vált megvalósíthatóvá. A megfelelő hozam elérése érdekében a reakció optimalizálása elengedhetetlen, így a reakcióban alkalmazható szubsztrátok vizsgálata előtt a megfelelő reakciókörülményeket kellett megtalálnom.

A hőmérséklet, palládium-katalizátor és additív réz-vegyület mennyisége és a megfelelő oldószer kiválasztása után a reakcióban alkalmazott sav koncentrációjának reakciósebességre és konverzióra gyakorolt hatását vizsgáltam.

Az optimális reakciókörülmények meghatározása után az előállított S-alkil-dibenzotiofénium sók C-H aktiválási reakciókban való alkalmazhatóságát vizsgáltam számos szubsztrát példáján.

**ISPÁN DÁVID**  
*divad678@gmail.com*  
Vegyész  
MSc, 1. félév  
Pannon Egyetem  
Mérnöki Kar

*Témavezetők:*  
*Skodáné Dr. Földes Rita*  
*egyetemi tanár, PE MK*  
*Szánti-Pintér Eszter*  
*tanársegéd, PE MK*

---

### **Változtatható polaritású oldószerek alkalmazása szteroidok Claisen-Schmidt reakciójában**

*Kulcsszavak: szteroid; ionfolyadék; reverzibilis; Claisen-Schmidt kondenzáció; polaritás*

A változtatható polaritású oldószerek olyan anyagok, amelyek valamilyen külső hatás (pl. CO<sub>2</sub> jelenléte) következtében molekuláris állapotból ionos állapotba kerülnek. Alkalmazásuk megkönnyítheti a szerves reakciók termékeinek elkülönítését, vagy katalizátorok többszöri felhasználását.

Kutatásom során különböző, oldalláncban aromás gyűrűt tartalmazó szteroid származékokat állítottam elő báziskatalizált Claisen-Schmidt kondenzációs reakcióval. Változtatható polaritású oldószerként olyan vegyületet használtam, mely bázikus komponensként egyben katalizátor is (N,N,N',N'-tetrametil-N''-butil-guanidin, továbbiakban TMBG). A reakció lejátszódása után az elegyhez CO<sub>2</sub>-ot adva a kezdetben apoláris vagy kevésbé poláris molekula egy polárisabb, ionos vegyületté alakul. A képződött ionfolyadék apoláris oldószerrel nem elegyedik, így a terméket extrakcióval el lehet különíteni. Ezt követően a szén-dioxid melegítéssel eltávolítható, így a rendszer újra molekuláris állapotba kerül.

Kutatómunkám során 5 $\alpha$ -androsztán-17-on és benzaldehid modellreakciójából sikeresen meghatároztam az optimális reakciókörülményeket. Az ionfolyadék oda- és visszaalakulását konduktometriásan követtem. A mérési eredményekből megállapítottam a visszaalakítás optimális paramétereit. Ezt követően a változtatható polaritású oldószert három körön keresztül hatékonyan újra fel tudtam használni.

Az itt nyert adatok ismeretében különböző aromás aldehidekkel további androsztán- illetve ösztán alapvázal rendelkező származékokat állítottam elő. Ezek közül néhány vegyület a szakirodalomban ismert, szerkezetileg hasonló olyan 17 $\beta$ -HSD1 és 17 $\beta$ -HSD2 enzim inhibitorokhoz, melyek hormonfüggő tumoros megbetegedések kezelésére lehetnek alkalmasak. A már ismert szerkezetű szteroid származékok mellett további nyolc, a szakirodalomban eddig nem ismert vegyületet állítottam elő, melyeknek szintén lehet gyógyászati jelentőségük.

A kapott vegyületek szerkezetét minden esetben <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR, infravörös- valamint tömegspektrumok alapján igazoltam.

A kidolgozott eljárás segítségével biológiailag aktív vegyületek hatékony, új és környezetbarát szintézisére nyílt lehetőség.

## GYÚJTÓ IMRE

gyujtoimre@gmail.com

Gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:

Dr. Nagy József

egyetemi docens, BME VBK

### Váratlan, bázis hatására bekövetkező átrendeződési reakció a 3-acetil-2-metil-3,4-dihidro-2H-1,2,3-benzotiadiazin-1,1-dioxid származékok körében

**Kulcsszavak:** redukció; acetilezés; alkilezés; gyűrűszűkülés; mechanizmus

Az Egis Gyógyszergyárban már közel két évtizede foglalkoznak ftalazinon-származékokhoz hasonló 2H-1,2,3-benzotiadiazin-1,1-dioxid alapvázatot tartalmazó vegyületek szintézisével és farmakológiai vizsgálatával. A Hatóanyagfejlesztési főosztályon a központi idegrendszerre ható anyagok kutatása során tanulmányozták a vegyületcsoport redukciós, acetilezési és alkilezési reakcióit, hogy potenciális PAM aktivitással rendelkező N,N'-diszubsztituált molekulákat állítsanak elő. Munkám alapját ezen kutatások során észlelt egyik meglepő reakció képezi, melynek során megkísérelték a 3-acetil-7,8-diklór-2,4-dimetil-3,4-dihidro-2H-1,2,3-benzotiadiazin-1,1-dioxid (3) acetilcsoportját  $\text{LiAlH}_4$  jelenlétében etilcsoporttá redukálni, azonban nem a várt 3-etil-származék keletkezett, hanem a reagens bázisként viselkedett és gyűrűszűkülés történt. Más bázisok jelenlétében is azonos átrendeződés ment végbe, így szükségessé vált a reakció részletes tanulmányozása. Ezért célul tűztük ki a reakció kiterjeszthetőségének a vizsgálatát a 4-es helyzetben más szubsztituenseket hordozó analóg vegyületekre. Továbbá kísérleteket végeztünk az átrendeződés optimális reakciókörülményeinek meghatározására. Sikerült találni olyan reakciókörülményeket, amelyek magas termeléssel, reprodukálhatóan biztosítják 4 és vele rokon szerkezetű vegyületek keletkezését.





## **Szerves kémia IV.**



**KISS ÁGOSTON**

*kiss.goston@gmail.com*

Vegyésmérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Faigl Ferenc*

*egyetemi tanár, BME VBK*

*Dr. Mátravölgyi Béla*

*tudományos munkatárs, BME VBK*

*Hergert Tamás*

*PhD hallgató, BME VBK*

---

### **1-Fenilpirrol alapvázú, atropizomer foszforamidok előállítása és vizsgálata**

*Kulcsszavak: fémorganikus katalízis; ligandum; enantioszelektív addíció*

Dr. Faigl Ferenc csoportjában már több éve folynak kutatások 1-fenilpirrol alapvázú, axiális aszimmetrialelemű vegyületek szintézisére. Az ilyen atropizomer vegyületek széles körben alkalmazhatók aszimmetrikus szintézisekben ligandumként vagy organokatalizátorként. Az ilyen enantioszelektív reakciók során értékes, az egyik enantiomerben dúsabb szekunder alkoholokat kapunk, amelyek királis, biológiailag aktív molekulák előállítása során kulcsintermedierek lehetnek. A kutatásba bekapcsolódva kísérleteket végeztem - az irodalomban még nem publikált - enantiomertiszta, optikailag aktív foszforamid típusú katalizátor előállítására 1-[2-karboxi-6-(trifluormetil)fenil-1H-pirrol-2-karbonsavból kiindulva. Elsőként egy 1-fenilpirrol alapvázú diaminszármazék intermediert állítottam elő – melynek szintézisét racemizáció megtörténte nélkül lehetett megvalósítani – a fent említett dikarbonsavból kiindulva. Munkám során a dikarbonsav karboxilcsoportjainak szelektív észterezése után, a funkciók megfelelő továbbalakításával, több lépésben szintetizáltam a diamin származék vegyületet kutatócsoportunk korábbi eredményeire támaszkodva. Munkám második részében, naft-1-il-magnézium-bromid és dietil-fosztit reakciójával, majd egy oxidációs lépés és savklorid képzés után sikerrel állítottam elő irodalmi analógia alapján egy foszfinsav-klorid-származékot.

Ez után következett a célvegyület szintetizálása, melyet a diamin-származék és foszfinsav-klorid-származék vegyületek reagáltatásával kaptam meg. Az újonnan előállított bifunkciós atropizomer molekulát sikeresen teszteltem benzaldehid és dietil-cink enantioszelektív addíciós reakciójában, mint katalizátorligandum.

**KOZMA VIKTÓRIA**

kozma.viktoria92@gmail.com

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezető:*

*Szöllősi György*

*tudományos főmunkatárs, SZTE TTIK*

---

## **Aldehidek aszimmetrikus Michael-addíciója maleimidekre homogén és heterogenizált királis diaminszármazékokkal**

*Kulcsszavak: N-fenil-maleimid; izobutiraldehid; gyanta; enantioszelektív; katalízis*

A Michael-addíció egy termodinamikailag kontrollált konjugált addíció, mely egy stabilizált nukleofil vegyület, azaz Michael-donor és egy aktivált telítetlen szénhidrogén, azaz Michael-akceptor között megy végbe. Számos Michael-akceptor közül kiemelkedő jelentősége van a maleimidszármazékoknak, melyekre gyakran addicionáltattak enantioszelektíven aldehideket vagy ketonokat optikailag aktív katalizátor jelenlétében. A képződő királis szukcinimidszármazékok a gyógyszeriparban optikailag tiszta építőelemekként alkalmazhatók, értékes intermediereket nyerve belőlük. Királis 1,2-diaminszármazékok katalizátorként való alkalmazása során rendkívül magas enantiomer feleslegek érhetők el, azonban a hatásos katalizátorok szerkezete bonyolult, előállításuk nehézkes [1].

Célul tűztük ki aldehidek maleimidszármazékokra történő enantioszelektív addíciójának vizsgálatát, könnyen hozzáférhető királis 1,2-diamin-származékokat használva katalizátorként. Vizsgáltuk a katalizátor szerkezetének hatását számos aldehid- és maleimidszármazék aszimmetrikus Michael-reakciójában. A körülmények optimalizálásával igyekeztünk minél magasabb enantiomer többletet elérni.

Bizonyítottuk a reakció gyakorlati alkalmazásának lehetőségét. A királis szukcinimid adduktumokat jó termeléssel, és ami még fontosabb, kiváló optikai tisztaságban állítottuk elő egyszerű difenil-etilén-1,2-diamin monoszulfonamidjaival. Megfigyeléseinket felhasználtuk a reakcióban szerepet játszó átmeneti állapot szerkezetének kiderítésére, amelyek jól tükrözték a különböző katalizátorok és reaktánsok reakcióiban elért eredményeket.

A hatásos királis diamin katalizátort rögzítettük különböző szervetlen és szerves hordozókon változatos funkciós csoportokat, azaz szulfonamid, tiokarbamid vagy négyzetamid csoportokat, használva az egyik amino csoport felülethez történő kötéseire. A heterogenizált katalizátorok közül a szerves polisztirol gyantán szulfonsavamid csoportokon keresztül rögzített katalizátorok bizonyultak a leghatásosabbaknak, amelyek alkalmazásával megközelítettük a homogén rendszerben elért enantioszelektivitásokat, ugyanakkor többszöri felhasználásuk is lehetővé vált.

[1] Chauhan, P., Kaur, J., Chimni, S. S., Chem. Asian J., 8, 328-346, (2013)

**PÁLVÖLGYI ÁDÁM MÁRK**

*palvadam@yahoo.com*

Gyógyszervegyész-mérnöki MSc

MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Bakó Péter*

*egyetemi magántanár (nyugdíjas), BME VBK*

*Dr. Rapi Zsolt*

*tudományos munkatárs, BME VBK*

---

### **D-Glükopiranozid alapú királis koronaéterek szintézise és alkalmazása enantioszelektív katalizátorként**

*Kulcsszavak: szerves kémia; preparatív kémia; makrociklusok; fázistranszfer katalízis; aszimmetrikus szintézisek*

A modern kémia egyik legnagyobb kihívását az enantiomertiszta vegyületek előállítása jelenti. Ebben egyre fontosabb szerep jut az aszimmetrikus szintéziseknek, hiszen e reakciók alkalmazása gazdasági és környezetvédelmi szempontokból egyaránt előnyös. Kutatómunkám során könnyen hozzáférhető és olcsó természetes anyagokból kiindulva olyan monoszacharid alapú királis koronaétereket állítottam elő, amelyek fázistranszfer reakciókban katalizátorként alkalmazva már enyhe körülmények között is aszimmetrikus indukciót válthatnak ki. Munkám fő célja az volt, hogy az általam előállított katalizátorokat alkalmazva olyan, minél nagyobb enantiomertisztaságú vegyületeket állítsak elő, amelyek biológiai aktivitással rendelkeznek vagy potenciálisan királis intermediereként alkalmazhatók.

D-Glükózból kiindulva két különböző szintézisstratégiát alkalmazva három  $\alpha$ -D-glükopiranozid alapú és két  $\beta$ -analogon koronaétert állítottam elő. Ezen makrociklusok a glikozidos hidroxilcsoporton különböző típusú és térállású helyettesítőt tartalmaznak, valamint eltérő oldalkarral rendelkeznek.

Az új, D-glükóz makrociklusokat különféle fázistranszfer reakciók katalizátoraként alkalmaztam. Ezekben a vizsgált lariat éterek jelentős mértékű aszimmetrikus indukciót generáltak, amelynek eredményeként több esetben 90%-nál is nagyobb enantiomerfelesleggel keletkeztek a megfelelő termékek. Az eredmények alapján összefüggéseket állapítottam meg a koronaéterek szerkezete és az általuk kiváltott katalitikus hatás között.

Emellett részletesen foglalkoztam szubsztituált benzilidénmalonitrilek ciklopropángyűrű képződésével járó reakciójával (MIRC-reakció), valamint helyettesített transz-kalkonok Michael-addíciójával. Sikertől összefüggéseket megállapítanom a szubsztituensek helyzete, minősége és az aszimmetrikus indukció mértéke között. Ezen reakciók során is több esetben 90% feletti enantiomerfelesleggel izoláltam a megfelelő termékeket.

Továbbá sikeresen optimalizáltam 2'-hidroxikalkon aszimmetrikus gyűrűzárási reakcióját, amelynek sikeres megvalósítása az irodalomban még nem ismeretes. Az optimalizálás eredményeként a flavanon terméket több alkalommal is sikerült 40-50%-os enantiomerfelesleggel kinyernem.

A munkám során előállított optikailag aktív flavanon biológiai aktivitással bír, a királis epoxiketonok, ciklopropán-származékok és Michael-adduktok pedig jelentős királis intermedierek lehetnek biológiai aktív vegyületek szintéziséhez.

**VARGA BENCE**

vargabence42@gmail.com

Vegyésmérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Bagi Péter*

*posztdoktor, BME VBK*

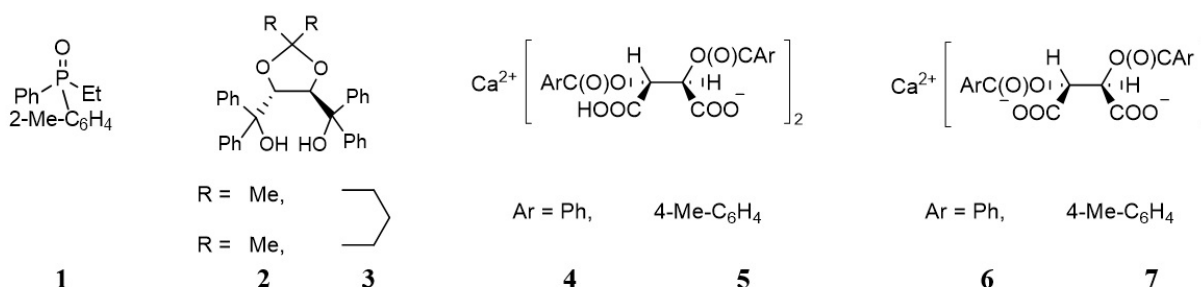
*Dr. Keglevich György*

*egyetemi tanár, BME VBK*

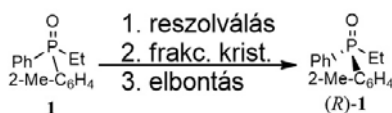
### Etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxid rezolválása TADDOL- és borkősav-származékokkal

*Kulcsszavak: foszfin-oxid; komplex-képzés; optikailag aktív; p-aszimmetria centrum; rezolválás*

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszékén a foszforkémiával és rezolválással is foglalkozó kutatócsoport munkájába bekapcsolódva, TDK munkám során célul tűztük ki, hogy a kutatócsoportban korábban heterociklusos foszfin-oxidok enantiomerjeinek elválasztására kidolgozott rezolválási módszereket kiterjesszük aciklusos foszfin-oxidokra, modellvegyületként az etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxidot (1) alkalmazva.



A racém etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxid (1) szintézisének kidolgozása után, annak rezolválását vizsgáltuk TADDOL-származékokkal (2 és 3), illetve (–)-O,O'-dibenzoil- és (–)-O,O'-di-p-tolouil-borkősav savanyú és semleges (4-7)  $\text{Ca}^{2+}$ -sóival. Optimalizáltuk a rezolválás során alkalmazott körülményeket. Emellett egy rezolválási technológiához elengedhetetlen lépésként, az etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxid (1) enantiomerkeverék tisztítási és racemizációs lehetőségeit is vizsgáltuk. Az elvégzett rezolválási és enantiomerkeverék-tisztítási kísérletsorozat végén 99% enantiomertisztségű (R)-etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxidot [(R)-2] tudtunk előállítani. Egy esetben a keletkezett diaszteromer asszociátumot egykristály röntgendiffrakciós méréssel is tanulmányoztuk.



**NEMCSOK TAMÁS**

*tamas002@hotmail.com*

Gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:*

*Dr. Bakó Péter*

*egyetemi magántanár (nyugdíjas), BME VBK*

*Dr. Rapi Zsolt*

*tudományos munkatárs, BME VBK*

---

### **Királis koronaéterek szintézise és alkalmazása enantioszelektív katalizátorként**

*Kulcsszavak: királis koronaéter; aszimmetrikus szintézis; fázistranszfer katalízis*

Napjaink egyik legjelentősebb kihívása az enantiomertiszta vegyületek előállítása. Kutatómunkám során természetes alapanyagokból kiindulva olyan királis koronaétereket állítottam elő, melyek egyes fázistranszfer reakciókban katalizátorként alkalmazva aszimmetrikus indukciót válthatnak ki. A szintetizált koronavegyületeket enantioszelektív katalizátorként alkalmaztam különböző fázistranszfer reakciókban. A fő cél az volt, hogy új és/vagy minél nagyobb enantiomerfelesleggel rendelkező vegyületek képződjenek, amelyek potenciálisan királis intermediereként alkalmazhatók. Dietil-L-tartarátból kiindulva sikeresen állítottam elő három L-treitol alapú lariat étert, többlépéses szintézisekkel. A védőcsoport, illetve az oldalkar minőségét változtatva kísérletet tettem a csoportunkban korábban előállított L-treitol alapú koronaéterek szerkezetének optimalizálására. L-Borkősavból kiindulva sikeresen szintetizáltam egy további, az L-treitolos makrociklushoz igen hasonló, királis pirrolidin gyűrűt tartalmazó koronaétert is. Előállítottam továbbá két, (öttagú gyűrűs) glükofuranozid egységet tartalmazó koronavegyületet.

Az általam előállított koronaéterek hatását különböző reakcióban vizsgáltam. Az L-treitol alapú és hasonló szerkezetű katalizátorok több esetben jelentős aszimmetrikus indukciót váltottak ki bizonyos Michael-addíciókban és ciklopropángyűrű képződésével járó reakcióban. Számos reakciót valósítottam meg továbbá a csoportunkban korábban előállított leghatásosabb metil- $\alpha$ -D-glükopiranozidból felépülő katalizátor alkalmazásával. Részletesen vizsgáltam szubsztituált transz-kalkonok és dietil-acetoximalonát Michael-addícióját, illetve szubsztituált benzilidén-malonitrilek és dietil-brómmalonát ciklopropángyűrű képződésével járó reakcióját. Összefüggéseket állapítottam meg a szubsztituensek minősége, helyzete és a kiváltott aszimmetrikus indukció mértéke között. A szintézisek során több esetben 90 % vagy annál nagyobb enantiomertisztasággal keletkeztek a megfelelő termékek.

**SZABÓ ZITA**

*szabozita21@hotmail.com*

Vegyésmérnöki alapképzési szak

BSc, 6. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:*

*Dr. Faigl Ferenc*

*egyetemi tanár, BME VBK*

---

**Optikailag aktív fenil-pirrol alapú amino-alkoholok előállítása és alkalmazásuk királis ligandumként**

*Kulcsszavak: optikailag aktív; királis ligandum; aminoalkohol; dietilcink*

TDK munkám során bifenilpirrolból kiindulva különböző optikailag aktív, gyűrűs és nyílt szénláncú aminoalkohol származékokat állítottam elő. Az intermediereként előállított királis monoészter-származék szabad karboxilcsoportját savamiddá alakítottam, majd az észtercsoportot fenilmagnézium-kloriddal reagáltatva képeztem a terciér alkoholt. Az amidcsoport redukciója után kapott aminalkoholt királis ligandumként alkalmaztam dietilcink és benzaldehid addíciós reakciójában.



## GYÖRKE GÁBOR

theprogressivee@gmail.com

Kémia

BSc, 7. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezetők:

Farkas Viktor

tudományos munkatárs, ELTE TTK

Goldschmidtné Gőz Viktória

PhD hallgató, ELTE TTK

### Szelektivitási lehetőségek 4-amino-piránuronsav származékok szintézisénel

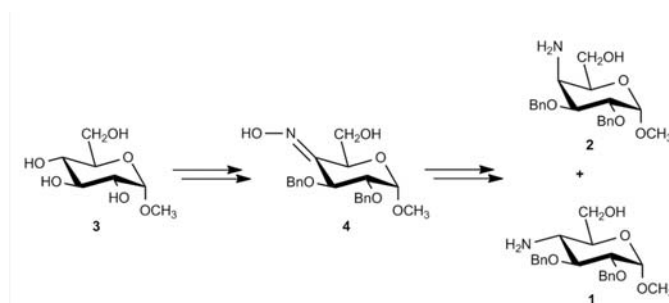
*Kulcsszavak: cukoraminosav, oximredukció, cukorkémia*

Gyógyszerkutatásban egyre elterjedtebb módszerek közé tartozik a szervezetben is megtalálható fehérjék részének vagy egészének foldamerekkel való helyettesítése. A foldamereket alkotó monomerek lehetnek például  $\beta$ -aminosavak [1], vagy cukoraminosavak [2] is.

Munkám fő célja a metil-4-amino-4-dezoxi-2,3-di-O-benzil- $\alpha$ -D-glükopiranozid (1) és metil-4-amino-4-dezoxi-2,3-di-O-benzil- $\alpha$ -D-galaktopiranozid (2) szintézise volt, melyek intermedierei különböző cukoraminosavaknak.

A kiindulási metil- $\alpha$ -D-glükopiranozid (3) 2-es és 3-as helyzetű hidroxilcsoportjainak szelektív védelméhez ortogonális védőcsoport stratégiát alkalmaztam. Ennek első lépéseként a 4,6-O-p-metoxi-benzilidén védett származékot állítottam elő, majd benzil védőcsoportot vittem be ennek 2,3-as pozíciójába. A p-metoxi-benzilidén védelmet kálium-hidrogén-szulfátos savas hidrolízissel eltávolítottam, így a kívánt védett származékhoz jutottam.

Amin prekuzorként az oximot választottuk, amit két lépésben állítottam elő. Az oxim származékból (4) kiindulva csak a lítium-alumínium-hidrides redukció vezetett közvetlenül eredményre a glüko származékot (1) adva közepes, 60%-os termeléssel. A módszer előnye, hogy sztereoszelektív, mely ugyanakkor hátrány is, mert így csak az egyik származékhoz juthatunk.



1. ábra: Az alkalmazott új szintézisút

A megoldást egy új, hidroxilamin származékokon keresztül folytatott kétlépéses szintézis jelentette. A módszer előnye, hogy mindkét kívánt amino származékot a két lépés során kiváló, 89%-os össztermeléssel előállítottam.

[1] S. H. Gellman; Acc. Chem. Res.; (1998), 31 (4), 173-180

[2] M. D. P. Risseuw, M. Overhand, G. W. J. Fleet, M. I. Simone; Tetrahedron: Asymmetry; (2007), 18, 2001-201

**KOLCSÁR VANESSZA JUDIT**

vanessza.judit@gmail.com

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezető:*

*Szóllósi György*

*tudományos főmunkatárs, SZTE TTIK*

---

## **Természetes biopolimerek kiralitásának használata ketonok enantioszelektív transzfer hidrogénezésében**

*Kulcsszavak: enantioszelektív, kitozán, ruténium, acetofenon, heterociklusos*

A szerves kémia egyik alapvető feladata optikailag tiszta vegyületek szintézise, melyek katalitikus megvalósítása napjaink kutatásainak középpontjába került. A katalitikus transzfer hidrogénezések kiváló példái ezeknek a folyamatoknak, melyek során prokirális vegyületekből optikailag aktív telített anyagok állíthatók elő. Kutatásom prokirális ketonok enantioszelektív transzfer hidrogénezésének egyszerű, környezetbarát, hatékony módjának kidolgozására irányult. Napjaink kihívásainak megfelelően olcsó és könnyen hozzáférhető, természetes eredetű ligandumot tartalmazó katalizátorként, in situ képződő Ru-kitozán komplexet használtam vizes közegben. Ugyanakkor számos vizsgálatban más kitozán származékot is alkalmazva, valamint a kialakuló komplexet külön előállítva próbáltam információt gyűjteni az aktív katalizátor szerkezetéről és működéséről. Kezdetben acetofenon és származékainak transzfer hidrogénezését vizsgáltam, majd a számos vegyülettel elért eredmények összevetésével leírtam a molekulák szerkezetének hatását a reakció kimenetelére. Az így kifejlesztett katalitikus rendszerben meghatároztam a kiváló enantiomerfelesleg eléréséhez szükséges kiindulási anyag szerkezeti feltételeit. Vizsgálataim alapján fény derült arra, hogy heterociklusos ketonok reakcióiban kiemelkedő, 97%-os enantiomerfelesleg is elérhető, ami egyrészt a merev gyűrű térgátlásának, másrészt a heteroatom és a katalizátor kedvező kölcsönhatásának tulajdonítható.

Ketonok transzfer hidrogénezése (R: funkciós csoport, X: CH<sub>2</sub>, O, S)  
A vizsgált több mint 50 prokirális keton reakciója kiválóan bizonyította a kifejlesztett rendszer széleskörű alkalmazhatóságát. Ugyanakkor a heterociklusos ketonok reakcióiban előállított nagy optikai tisztaságú termékekhez hasonló enantioszelektivitást eddig még nem jegyeztek fel természetes királis ligandumot tartalmazó katalizátor használatával transzfer hidrogénezésekben.

**KELEMEN VIKTOR**  
*leomoonlight@gmail.com*  
Gyógyszerész  
Osztatlan, 10. félév  
Debreceni Egyetem  
Gyógyszerésztudományi Kar

*Témavezetők:*  
*Dr. Borbás Anikó*  
*tanszékvezető egyetemi tanár, DE GYTK*  
*Dr. Csávás Magdolna*  
*egyetemi adjunktus, DE GYTK*

---

### **Új lipoglikopeptid antibiotikumok előállítása teikoplanin-pszeudoaglikonból**

*Kulcsszavak: antibiotikum-rezisztencia; glikopeptid, maleinimid, click-reakció, antibakteriális*

Munkám során a teikoplanin-pszeudoaglikonon végeztem módosításokat, célunk a molekula lipofilitásának növelése, ezzel pedig antibiotikus hatásának fokozása, és rezisztens baktériumtörzsek elleni hatékonyságának növelése volt. Hét új, lipofil oldallánccal módosított teikoplanin-származékot állítottam elő: egy n-hexil-származékot, valamint három-három bisz-n-butiltio- és bisz-n-hexiltio-maleinimid-származékot.

A kutatások során a teikoplanin-pszeudoaglikon primer aminocsoportjával, illetve az abból képzett aziddal reagáltattam az alkil, illetve a bisz-alkiltio-maleinimid-származékokat. Az alkil oldallánc (n-hexil-propargil-éter) előállításához n-hexanolt és propargil-bromidot használtam fel. A teikoplanin-pszeudoaglikon-azidhoz click reakcióval kapcsoltam. Kiderült, hogy ez a rövid, n-hexil oldallánccal rendelkező teikoplanin-pszeudoaglikon-származék jelentős hatással bír olyan kórokozók ellen is, melyek mind a teikoplaninra, mind a teikoplanin-pszeudoaglikonra rezisztensek voltak.

A maleinimid-származékok előállításához 2,3-dibróm-maleinimidet használtam, melyet etoxi-karbonil csoporttal, majd propargilcsoporttal, illetve TEG-propargil csoporttal láttam el. Az etoxi-karbonil csoporttal rendelkező származékokat közvetlenül kapcsoltam a teikoplanin-pszeudoaglikonhoz, a propargilcsoporttal rendelkező származékokat pedig click reakcióval kapcsoltam a teikoplanin-pszeudoaglikon-azidhoz.

Az antibakteriális vizsgálatok eredményéből látható volt, hogy a lipofil oldallánccal, oldallánccal való módosítás valóban megnövelte a teikoplanin antibakteriális hatását.



## **Szervetlen kémia és bioszervetlen kémia**



**HERMANN ENIKŐ**

*eniko.hermann@gmail.com*

Kémia BSc

BSc, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Gyurcsik Béla*

*egyetemi docens, SZTE TTIK*

*Wéber Edit*

*tudományos munkatárs, SZTE GYTK*

---

**Az N-terminális aminosavak szerepének vizsgálata a Colicin E7 fehérje nukleáz doménjében**

*Kulcsszavak: Colicin E7; mesterséges nukleáz; allosztérikus szabályozás; fehérje NMR;*

A Colicin E7 (ColE7) nukleáz doménjének (NColE7) tulajdonságai az enzim pozitív allosztérikus szabályozására adnak lehetőséget, mivel az NColE7 aktív központja annak C-terminális végén található, ám az N-terminálisan csonkított változataiban is megszűnik, vagy jelentősen csökken a DNS hasító képesség. [1] Az MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoportban a fentiek miatt tanulmányozzák az NColE7 enzimet újszerű mesterséges nukleázok előállítására céljából. Munkánk során célul tűztük ki az NColE7 nukleáz N-terminális szekvenciájában található aminosavak szerepének pontosabb megismerését az NColE7 DNS hasításának mechanizmusában. Ennek folyamán vizsgáltuk az N-terminálisan csonkított NColE7 alapú nukleázok DNS hasításának időfüggését, in vitro kísérletekben. A C127 fehérjét, amelynek az NColE7-hez képest hiányzik négy N-terminális aminosava, további kísérletekben is megvizsgáltuk úgy, hogy a fehérje mellé oldatként hozzáadtuk az N-terminális végről hiányzó KRNK tetrapeptidet, más mérésekben pedig a négy N-terminális aminosav közül a mechanizmus szempontjából legfontosabbnak ítélt arginint (R), és vizsgáltuk ennek hatását az enzim aktivitására. A fentieket plazmid DNS hasítását megfigyelve követtük, és agaróz gélelektroforézis segítségével tettük láthatóvá az eredményeinket. Az NColE7 és a C127 fehérjék szerkezetét korábban csak röntgenkristallográfiás mérések segítségével állapították meg. Az oldatbeli szerkezet megismerése, és az esetleges szerkezeti különbségek megállapítása érdekében a fent említett két enzimet NMR spektroszkópia segítségével is megvizsgáltuk. Ennek során feladatom az NColE7 háromdimenziós NMR spektrumában kapott jelek hozzárendelése volt. Ezek alapján meghatároztuk mindkét enzimben az egyes láncrészek valószínűsíthető másodlagos szerkezetét, és következtetéseket vontunk le szerkezeti stabilitásukkal kapcsolatban.

[1] A. Czene, E. Németh, I. G. Zóka, N. I. Jakab-Simon, T. Körtvélyesi, K. Nagata, H. E. M. Christensen, B. Gyurcsik, J. Biol. Inorg. Chem, 18 (3), 309-321 (2013)

**PÁLINKÁS DÓRA CSILLA**

*palinkasdora33@gmail.com*

Kémia

BSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:*

*Dr. Várnagy Katalin  
egyetemi tanár, DE TTK*

---

### **Cisztein tartalmú tetrapeptidek nikkel(II)-komplexei**

*Kulcsszavak: cisztein; tetrapeptid; nikkel(II)-komplex; potenciometria; spektroszkópia*

A nikkel az élő szervezetekben gyakran tiolátcsoportokhoz kötődve található meg, s így fejt ki – az eddig rendelkezésre álló információk alapján az ember esetében nem létfontosságú – hatását.

Ennek kapcsán a Debreceni Egyetem Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoportjában intenzív kutatások folynak az eltérő koordinációs tulajdonságú, cisztein tartalmú peptidek Ni(II)-komplexeinek oldategyensúlyi vizsgálatára.

Az eddigi vizsgálatok alkalmával megállapították, hogy a különböző aminosavszekvenciájú, több ciszteint, illetve cisztein mellett más koordinálódásra képes oldalláncot is tartalmazó peptidekkel a Ni(II)-ionok igen változatos szerkezetű komplexeket alkothatnak.

Ebbe a kutatási folyamatba kapcsolódtam be két cisztein tartalmú, terminálisan védett tetrapeptid (Ac-CysGlyAlaAsp-NH<sub>2</sub> és Ac-CysGlyAlaHis-NH<sub>2</sub>) szintézisével, illetve Ni(II)-ionokkal alkotott komplexeinek vizsgálatával.

A pH-potenciometriás, UV-Vis és CD spektroszkópiás vizsgálatok alapján megállapítottuk, hogy mindkét ligandum nagy stabilitással köti a nikkel(II) iont. Mindkét esetben a koordináció a két oldalláncbeli donorcsoporton kezdődik, (S<sup>-</sup>, Im(N)), illetve (S<sup>-</sup>, COO<sup>-</sup>) koordinációjú mono- és az Ac-CGAH ligandum esetén bisz-komplexek is képződnek. A pH emelésével, pH 8 felett lejátszódik az amidnitrogének deprotonálódása és koordinációja. [NiAH<sub>2</sub>] jelenik meg két amidnitrogén kooperatív deprotonálódását követően, majd a pH további növelésével [NiAH<sub>3</sub>] komplex képződik. Ugyanakkor a koordinációs módok vizsgálata a két ligandum esetén meglepően eltérő eredményeket hozott. A szerkezetvizsgálatok alkalmával ugyanis kiderült, hogy az Ac-CGAH szekvenciájú peptid esetén az amidnitrogének deprotonálódását követően a tiolcsoport gyengébb kötőhelynek bizonyul az imodazolcsoporttal szemben, így kizorul a fémion koordinációs szférájából. Ezzel ellentétben az Ac-CGAD ligandum [NiAH<sub>2</sub>] és [NiAH<sub>3</sub>] komplexeiben az amidnitrogének mellett a cisztein vesz részt a koordinációban.



**KOVÁCS KORNÉLIA**  
*korneliakovacs94@gmail.com*  
Vegyésszmérnök  
BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem  
Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezetők:*  
*Veres Péter*  
*PhD hallgató, DE TTK*  
*Dr. Kalmár József*  
*egyetemi adjunktus, DE TTK*

---

### **Fluoreszceinnel funkcionizált hibrid aerogélek fotokémiai tulajdonságai**

*Kulcsszavak: szilika; aerogélek; fluoreszcein; zselatin*

Kutatómunkám során különböző, fluoreszcein kovalens kapcsolásával jelzett aerogélek és a szabad festékmolekula fluoreszcens tulajdonságait hasonlítottam össze. A méréseim során a fluoreszcencia élettartamot és fluoreszcencia spektrumokat vizsgáltam. A méréseket több készüléken is elvégeztem.

Az aerogélek karakterizálása során pórusméret eloszlásukat N<sub>2</sub> porozimetria segítségével határoztuk meg. Az eredményekből az látszik, hogy szilika aerogél 900 m<sup>2</sup>/g-os fajlagos felülete kb. 30%-ot csökkent a zselatin hatására, amelyet a fluoreszceinnel történt módosítás képes volt kisebb mértékben ellensúlyozni.

Mindegyik aerogélből szuszpenziót készítettem és fluoreszcens tulajdonságaikat különböző spektrofotométerekkel, illetve villanófény fotolízis készülék segítségével határoztam meg. Kontrollként szolgált a hidratált fluoreszcein és a normál szilika aerogél, ezek spektrumához hasonlítottam a fluoreszcens festékmolekula kovalens kapcsolásával jelzett aerogéleket. A spektrumok alakjából megállapítottam, hogy nem különböznek szignifikánsan, tehát a tiszta aerogéleknek is mérhető fluoreszcencia jele van és a fluoreszcein tulajdonságai nem változnak meg, ha aerogél vázhoz vannak kapcsolva. A fluoreszceint beépítve a fotofizikai tulajdonságai nem változnak meg, hanem olyan spektrumokat kapunk, ami tartalmazza a fluoreszcein és az aerogél emisszióját is.

Az élettartamok összehasonlításánál azt tapasztaltam, hogy azok a kontrollhoz képest sehol nem változnak szignifikánsan. Ez is azt jelenti, hogy fotofizikai tulajdonságai nem változnak meg a festékmolekulának a kapcsolástól. Molekulaszerkezete kevésbé torzul, és a körülötte levő hidratációs környezete sem torzul attól, hogy közel kerül a szilika felülethez. A kontrollokhoz történő hasonlítással megállapítható, hogy mindkét fluoreszcens jelenség úgy viselkedik, mintha különálló kromofor csoportoktól származna.

Különböző fluoreszcens mikroszkópok segítségével vizsgáltam a mintákat, és megállapítottam, hogy a minták globuláris szerkezetűek, továbbá azt, hogy a szelektíven jelzett szilika-zselatin aerogél esetében a zselatin eloszlása homogén a gélvázban. Kollégáink által végzett állatkísérletek során kapott eredményekből megállapítható, hogy sikeresen állítottunk elő olyan fluoreszcensen jelzett, részben biodegradálható aerogéleket, melyek migrációja a szervezetben nyomomonkövethető.

**MAJOR MÁTÉ MIKLÓS**  
*miklos.mate.major@gmail.com*  
Vegyész  
BSc, 7. félév  
Pannon Egyetem  
Mérnöki Kar

*Témavezetők:*  
*Dr Horváth Ottó*  
*egyetemi tanár, PE MK*  
*Dr. Valicsek Zsolt*  
*egyetemi adjunktus, PE MK*

---

### **Fotokatalitikus nikkel-porfirin rendszer átfogó jellemzése**

*Kulcsszavak: nikkel(II)-porfirin; fotokatalízis; statikus és dinamikus kioltás; triplett állapot; vízzoldható*

A természetes porfirinek számos élőlényben kulcsfontosságú szerepet játszanak nagy fényelnyelésüknek, elektronközvetítő és komplexképző tulajdonságuknak köszönhetően. A mesterségesen létrehozott rendszerekben elsősorban fotokatalitikus hatásuk miatt használnak különböző fém-porfirineket. Tanszékünkön korábban sikeresen hoztak létre kationos kobalt(III)- és mangán(III)-komplexekkel működő fotokatalitikus rendszereket [1].

Munkám célja a sikeres példákhoz hasonló fotokatalitikus körfolyamat megvalósítása nikkel-porfirinnel. A felhasznált komplex vizes oldatban egy kis- és egy nagyspinszámú formát is tartalmazó egyensúlyi rendszert alkot. Első lépésként jellemeztem az egyensúlyt, majd a fényelnyelési színeképek felbontásával meghatároztam a különböző elektronátmeneteket. Bevilágítás hatására az egyensúly eltolódását tapasztaltam, mely jelenség kinetikáját is kimértem. Az egyensúlyi rendszer a később elektrononorként használt trietanol-amin jelenlétében szintén megváltozott. A trietanol-amin a nikkel(II)-porfirinnel asszociátumot képez, amit a fénykisugárzás statikus kioltása is alá támaszt. A nikkel(II)-komplext alapállapotú jellemzését követően sikeresen alkalmaztam az említett fotokatalitikus rendszerben. A rendszer metil-viologén kationt (elektronakceptorként), trietanol-amint (elektrononorként) és Ni(II)TMPyP<sup>4+</sup>-et (fotoérzékenyítőként) tartalmazott, s a fotoreakció során metil-viologén gyökkation képződött. Meghatároztam a folyamat kvantumhasznosítási tényezőjét is, mely lúgosítás hatására növekedett.

A reakció mechanizmusának felderítéséhez lézervillanófény-fotolízis vizsgálatokat végeztem: a nikkel-komplex triplett gerjesztett állapotban exciplexet képez a trietanol-aminnal, ami jelentősen megnöveli az élettartamát. Ezáltal hatékonyabban mehet végre metil-viologén kationnal (mint kioltóval) az elektronátadási folyamat, amely alapvető fontosságú a fotokatalízisben. A kutatás eredményei nemzetközi folyóiratokban kerültek publikálásra. [2, 3] A munka megvalósítását az OTKA NN107310 és a TÁMOP-4.2.2B-15/1/KONV-2015-0004 projektek támogatták.

[1] Fodor M. A.; Horváth O.; Fodor L.; Grampp G.; Wankmüller A., Inorg. Chem. Commun. 2014, 50, 110–112.

[2] Major M. M.; Horváth O.; Fodor M. A.; Fodor L.; Valicsek Z.; Grampp G.; Wankmüller A., Inorg. Chem. Commun. 2016, 73, 1–3.

[3] Horváth O.; Valicsek Z.; Fodor M. A.; Major, M. M.; Imran M.; Grampp G.; Wankmüller A., Coord. Chem. Rev., 2016, 325 59–66.

**PÓSA VIVIEN**

*posavivien@gmail.com*

Kémia

BSc, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Enyedy Éva Anna*

*egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

*Dömötör Orsolya*

*tudományos segédmunkatárs, SZTE TTIK*

---

### **Hipoxia-aktivált kobaltkomplexek oldatkémiai vizsgálata**

*Kulcsszavak: EGFR-inhibitor; ciklikus voltammetria; humán szérum albumin; stabilitási állandó; lipofilitás*

A sejtek azáltal szabályozzák a bennük és környezetükben zajló folyamatok működését, hogy olyan jelátvivő molekulákat termelnek, amelyeket más sejtek receptorai érzékelni tudnak. Az epidermális növekedési faktor és receptorának (EGFR) kapcsolódásakor a továbbított üzenet fokozott sejtosztódást eredményez. Az EGFR rákos sejtek felszínén fokozott mértékben van jelen és számos EGFR inhibitor gyógyszermolekula van már klinikai alkalmazásban.

Az általam vizsgált  $[\text{Co(III)(N,N)(acac')}_2]\text{Cl}$  komplexek (N,N) donoratomokat tartalmazó ligandumai ilyen EGFR-inhibitor származékok ( $\text{acac}' = (\text{metil-}) \text{ acetilaceton}$ ). Ezek a kinetikailag inert Co(III)-komplexek a rákos szövetek oxigénhiányos (hipoxiás) környezetében feltételezhetően redukálódnak. Az így képződő labilis Co(II)-komplexek kisebb stabilitásúak, így valószínű a fémkomplexek disszociációja és a szabad EGFR-inhibitor ligandum kifejezheti hatását [1]. Munkám során vizsgáltam a komplexek lipofilitását, redoxi viselkedését ciklikus voltammetria, valamint UV-látható spektrofotometria segítségével fiziológiás redukálószer (aszcorbinsav, glutation) jelenlétében.

További alapvető kérdés a redukció során képződő Co(II)-komplexek vizes oldatbeli stabilitása, mivel a rákos szövetekben feltételezhetően ez a redukált komplex alakul ki. Ezen kérdés megválaszolására két Co(II) –  $\text{acac}$  – (N,N) vegyes ligandumú rendszert vizsgáltam pH-potenciometriás módszerrel ((N,N) = egy EGFR-inhibitor vagy N-metil-etiléndiamin modell ligandum).

Fontos kérdés egy potenciális gyógyszer vizsgálatokor a hatóanyag sorsa a szervezetbe kerüléskor (farmakokinetika). A vészérum alkotókkal való kölcsönhatás alapvetően befolyásolhatja a szervezetben való tartózkodási időt, ugyanakkor a célba juttatást is hatékonyan segítheti. Munkám során az egyik kiválasztott komplexnek, és (N,N) ligandumának humán szérum albuminnal való kölcsönhatását is vizsgáltam, mivel ez a vérben legnagyobb koncentrációban megtalálható szállító fehérje. Ezen kölcsönhatás vizsgálatára spektrofotometriás módszereket alkalmaztam: közvetlen-, ill. kötőhely-marker kizorításos méréseket végeztem.

[1] C.R. Kowol et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2014, 53, 12930-12935.

**KACSIR ISTVÁN**

*kacsiri14@gmail.com*

Vegyész

MSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:*

*Dr. Buglyó Péter*

*egyetemi docens, DE TTK*

---

**Maltolt és származékait tartalmazó  $[\text{CoIII}(4\text{N})(\text{O},\text{O})]\text{X}_2$  ( $4\text{N} = \text{tren, tpa}$ ;  $\text{X} = \text{Cl, ClO}_4$ )  
összetételű komplexek**

*Kulcsszavak: Co(III) ; maltol ; komplex ; hipoxia ; szintézis*

Modern korunk egyik legsúlyosabb betegsége a rák, emiatt ezen a területen intenzív kutatási munka folyik. A kutatások során megállapították, hogy a rákos szövetekben kialakuló hipoxia miatt, a fellépő redukzív környezet elvben szelektíven képes lehet például a Co(III) komplexeket a labilis Co(II) formává redukálni. A Co(III) komplexekben kötött rákellenes hatású ligandumok szelektív célbajuttatásával, a jelenlegi fémiontartalmú kemoterápiás szereknél hatékonyabb és kevesebb mellékhatással járó vegyületek állíthatók elő.

TDK munkám során az előző szakdolgozatom és az ismertetett irodalom alapján 4N típusú ligandumot (tren, tpa), valamint O,O kelátképzőt (maltol, etil-maltol, DHP) tartalmazó Co(III) komplexek előállítása volt a célom. Az előállított komplexek a  $[\text{CoIII}(\text{tren})\text{maltoláto}]\text{Cl}_2$ ,  $[\text{CoIII}(\text{tren})\text{maltoláto}](\text{ClO}_4)_2$ ,  $[\text{CoIII}(\text{tren})\text{etil-maltoláto}](\text{ClO}_4)_2$ ,  $[\text{CoIII}(\text{tren})\text{DHPH-1}](\text{ClO}_4)_2$ ,  $[\text{CoIII}(\text{tpa})\text{etil-maltoláto}](\text{ClO}_4)_2$ ,  $[\text{CoIII}(\text{tpa})\text{DHPH-1}](\text{ClO}_4)_2$ ,  $[\text{CoIII}(\text{tpa})\text{maltoláto}](\text{ClO}_4)_2$  voltak. A komplexek azonosságát és tisztaságát  $^1\text{H}$  NMR spektroszkópiával ellenőriztem. Megállapítottam, hogy a komplexképződés során izomerek is létrejönnek. Egy esetben pedig röntgendiffrakciós módszerrel sikerült meghatároznunk a vegyes ligandumú komplex molekulaszervezetét. A komplex a vártak szerint oktaéderez szerkezetű lett és a központi fémiont a 4N donor ligandum 4 nitrogénje, valamint az O,O kelátképző két oxigénje vette körül.

A ciklikus voltammetriás mérések esetén a komplexek redoxi sajátságait vizsgálva, arra a következtetésre jutottam, hogy az újonnan előállított komplexek is irreverzibilisen redukálhatóak a labilis Co(II) formává, és így ezek elvben alkalmasak lehetnek, a biológiai rendszerekre jellemző potenciáltartományban (-200 - (-400) mV) való redukcióra és várhatóan rákellenes hatású molekulák hordozójaként szolgálhatnak.

Mivel a használt maltolszármazék ligandumok többféleképpen is szubsztituálhatóak, például a DHP gyűrűnitrogénje hosszabb szénláncú aminnal helyettesíthető, így ezek ígéretes prekursorai lehetnek ambidentát hídligandumot tartalmazó kétfémes komplexeknek. A munka folytatásaként ezen prekursorok előállítása után a teljes hídligandumok előállítása, majd az ebből képzett kétfémes Co(III), Ru(II) komplexek szintézise és vizsgálata lesz a cél.

**HAJDU BÁLINT**

*balinth11@gmail.com*

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:*

*Gyurcsik Béla*

*egyetemi docens, SZTE TTIK*

*Czene Anikó*

*poszt doktor, SZTE TTIK*

---

### **Metallonukleázok kialakítása cinkujj fehérjék Ni(II)-indukált hasításán keresztül**

*Kulcsszavak: ATCUN motívum; cinkujj fehérje; CD spektroszkópia; tömegspektrometria; gélelektroforézis*

A cinkujjak moduláris felépítésű specifikus DNS kötő fehérjék, melyek oly módon tervezhetők, hogy szinte bármilyen kívánt DNS-bázis szakaszt felismerjenek. Ezáltal képesek a természetben szabályozni a gének működését, átíródását, de specifikus DNS módosító eszközökké is átalakíthatók, mint a cinkujj-nukleázok [1].

A közelmúltban felfedezték, hogy az (Ser/Thr)XaaHis aminosav szekvenciát tartalmazó fehérjék  $\text{Cu}^{2+}$  vagy  $\text{Ni}^{2+}$  -ionokkal specifikusan elhasíthatók (Xaa bármilyen aminosav lehet). A hidrolitikus folyamatban hátramaradó C-terminális hasítási termék N-terminális végén egy síknégyszetes fémkomplex alakul ki [2]. Ezen komplex korábbi ismereteink alapján képes a DNS specifikus hasítására [3].

A fenti két kísérlet kombinációja specifikus nukleázok in situ előállításához vezethet. Ezek alapján kutatásunk célja egy ilyen cinkujj-alapú mesterséges metallonukleáz előállítása és tanulmányozása volt.

Munkám során megállapítottam, hogy a cinkujj fehérjék szerkezete irreverzibilisen összeomlik  $\text{Cu}^{2+}$  -ionokkal végrehajtott hidrolízis során, viszont  $\text{Ni}^{2+}$  -ionokkal sikerült specifikus hidrolízist előidézni a tanulmányozott cinktartalmú fehérjében. A reakciókörülmények optimalizálását követően igazoltam, hogy a kialakult fehérje-Ni(II) komplexben a cinkujj motívumok szerkezete ép és azok továbbra is képesek megkötni DNS célszekvenciájukat.

Modellpeptidek segítségével optimalizáltam síknégyszetes Cu(II) és Ni(II) komplexek DNS hasítási reakcióit és megkezdtem a fehérje-Ni(II) komplex DNS reakciók vizsgálatát gélelektroforézis, cirkuláris dikroizmus spektroszkópia, valamint tömegspektrometria alkalmazásával.

[1] Kim YG, Cha J, Chandrasegaran S. Proc. Natl Acad. Sci. 93, 1156–1160 (1996)

[2] Kopera E., Krezel A., Protas A.M., Belczyk A., Bonna A., Wysłouch-Cieszyńska A., Poznański J., Bal W., Inorg Chem, 49, 6636-6645 (2010)

[3] Eric C. Long, Acc. Chem. Res., 32 (10), 827–836 (1999)

**NAGY SÁNDOR**

sandor1115@gmail.com

Vegyész

MSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:*

*Dr. Buglyó Péter*

*egyetemi docens, DE TTK*

---

### **(O,O) donor biomolekulák modellvegyületeinek [CoIII(4N)]<sup>n+</sup> típusú komplexekkel való reakciója és vizsgálata**

*Kulcsszavak: Co(III); quinizarin; 3-hidroxiflavonol; ciklikus voltammetria;*

A rákos megbetegedések kezelésére használt vegyületek nagy problémája a nem megfelelő szelektivitás, ennek következtében a daganatok kezelése során az egészséges sejtek is károsodnak. A kutatások során ezért egyre inkább előtérbe került szelektív vegyületek kifejlesztése. A szelektivitás alapjául az egészséges és rákos szövetek közötti különbségek szolgálhatnak. A daganatos szövetekre jellemző hipoxiás állapot elvi lehetőséget biztosít arra, hogy Co(III) komplexek a rákos szövetekre jellemző redukтивabb környezet következtében Co(II)-vé redukálódjanak és így szelektíven juttassák el a hatóanyagot a beteg sejtekhez.

TDK dolgozatomban (O,O) donor biomolekulák modellezésére alkalmas vegyületek reakcióját vizsgáltam [Co(4N)Cl<sub>2</sub>]Cl típusú vegyületekkel. Összességében a következő vegyületeket állítottuk elő: [(Co(tren))<sub>2</sub>(quinizarin)](ClO<sub>4</sub>)<sub>4</sub>, [(Co(tpa))<sub>2</sub>(quinizarin)](ClO<sub>4</sub>)<sub>4</sub>, [Co(tren)(3-Oflav)](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> és [Co(tpa)(3-Oflav)](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>. Az előállított vegyületeket IR és NMR spektroszkópiai módszerekkel, MS-sel valamint elemanalízissel vizsgáltam.

Az előállított vegyületek redoxi sajátságait ciklikus voltammetriás mérésekkel vizsgáltuk és összehasonlítottuk a korábban a Kutatócsoportban tanulmányozott, hasonló szerkezetű hidroxamát komplexekével. A [Co(tren)(3-Oflav)](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> katódos csúcspotenciálja a szuszbituált fenil-hidroxamátéhoz esett közel, továbbá a normál hidrogénelektrodra vonatkoztatott -0,258 V potenciál érték az élő szervezetekre jellemző -0,200 - -0,400 V tartományba esik, ami elvi lehetőséget teremt az ilyen típusú vegyületek prodrugként való alkalmazására. Az analóg [Co(tpa)(3-Oflav)](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> komplex ilyen jellegű vizsgálatát a vízben való rossz oldékonysága miatt nem tudtuk elvégezni. A [(Co(tren))<sub>2</sub>(quinizarin)](ClO<sub>4</sub>)<sub>4</sub> és a [(Co(tpa))<sub>2</sub>(quinizarin)](ClO<sub>4</sub>)<sub>4</sub> komplexek összetettebb voltammogramokat eredményeztek.

A továbbiakban szeretnénk elvégezni biológiai aktivitással rendelkező (O,O) vagy (O,N) donor modellvegyületek komplexbe vitelét is és a jellemzett vegyületek biológiai vizsgálatát ráksejt vonalakon

## Névmutató, résztvevő hallgatók

ÁDÁM PÉTER, 39  
ADAMCSIK BERNADETT, 194  
ADORJÁN AFRODITÉ EMESE, 84  
ALBERT KATALIN, 241  
ANGYAL DÁVID, 188  
ANGYAL PÉTER, 224  
BAKÓCZY ANDRÁS, 124  
BAKOS LÁSZLÓ PÉTER, 60  
BALÁZS CSABA, 154  
BALOG ÁDÁM, 46  
BALOGH ÁLEX KÁLMÁN, 116  
BALOGH FANNY, 204  
BARABÁS JÚLIA, 33  
BARCZIKAI DÓRA, 63  
BÁRDOS CSANÁD, 128  
BARTAL ATTILA, 30  
BARTAL BRIGITTA, 168  
BECSEI BÁLINT, 160  
BEDŐ ZSÓFIA, 69  
BENKE ZSANETT AMÁLIA, 217  
BENKŐ BENCE, 135  
BÉRCZES VIRÁG, 59  
BLANÁR ESZTER, 108  
BOBEK JANKA, 150  
BÓDI DORINA, 57  
BOGNÁR ZSOLT, 213  
BÖSZÖRMÉNYI ÉVA, 165  
BRAUN ÁDÁM, 16  
CSENKI JÁNOS TIVADAR, 223  
CZECZON ZSOMBOR, 148  
DÉVÉNYI DÁNIEL, 89  
DOMOKOS ANDRÁS, 134  
ELEKES PÉTER, 230  
FÁBIÁN ZITA, 80  
FARAGÓ ENDRE ZOLTÁN, 48  
FARAGÓ TÜNDE, 170  
FARKAS BALÁZS, 55, 149  
FAZEKAS ÁKOS FERENC, 176  
FERTIG DÁVID, 36  
FODOR ANGÉLA, 115  
FODOR ANNA ESZTER, 203  
FODOR HANNA, 157  
FÖLDVÁRI DOMINIC, 112

FÓNAGY PÉTER, 34  
FÓZER DÁNIEL, 72  
FRIDRICH BALINT, 195  
FÜREDI ADRIENNE, 29  
GAL CRISTIAN ANDREI, 67  
GÁL ISTVÁN, 96  
GANYECZ ÁDÁM, 106  
GERGŐ DOROTTYA, 93  
GÓGER SZABOLCS, 114  
GOMBKÖTŐ DÁNIEL, 228  
GYERGYÓSZEGI ZSÓFIA, 91  
GYŐRI TIBOR, 117  
GYÖRKE GÁBOR, 241  
GYÚJTÓ IMRE, 232  
HAJDU BÁLINT, 252  
HAJNAL ÁDÁM, 136  
HAMADI OMAR PÉTER, 147  
HAMPEL BOGLÁRKA, 37  
HARKAI ÁKOS, 79  
HEGEDÜS ESZTER, 25  
HEGEDÜS KRISTÓF, 211  
HENYECZ RÉKA, 212  
HERBAY RÉKA, 214  
HERMANN ENIKŐ, 246  
HORVÁTH SZABOLCS, 24  
IFJU ZSÓFIA, 175  
IGNÁCZ GERGŐ, 40  
ISPÁN DÁVID, 231  
JAKAB MIKLÓS, 81  
JÁNK NÓRA ANNA, 126  
JANOVSZKY PATRICK MARTIN, 12  
JANZSÓ-BEREND PÉTER ZOLTÁN, 219  
JUHÁSZ KINGA, 138  
KACSIR ISTVÁN, 251  
KÁNTOR IZOLDA, 179  
KELEMEN ÁDÁM ANDRÁS, 107  
KELEMEN VIKTOR, 243  
KEREZSI NIKOLETT DÓRA, 90  
KÉRI ORSOLYA, 35  
KÉSMÁRKI ANDRÁS, 159  
KIS-JAKAB KÁLMÁN, 140  
KISS ÁGOSTON, 235  
KISS KRISZTINA, 82

KISS TAMÁS, 200  
 KOLAROVSZKI ZOLTÁN, 125  
 KOLCSÁR VANESSZA JUDIT, 242  
 KÖRÖSI MÁRTON, 133  
 KOVÁCS KORNÉLIA, 248  
 KOVÁCS MÁRTON, 193  
 KOVÁCS MIKLÓS MÁRTON, 13  
 KOVÁCS TAMÁS, 104  
 KOZMA JÓZSEF, 19  
 KOZMA VIKTÓRIA, 236  
 KUBOVICS MÁRTA, 92  
 LAKÓ ÁGNES, 137  
 LÓNYI FLÓRA, 97  
 LUKÁCS MÁRTON, 171  
 MÁDAI ESZTER, 105  
 MAJOR MÁTÉ MIKLÓS, 249  
 MAKSÓ LILLA, 226  
 MARGÓCSY ÁDÁM, 111  
 MÁTÉFFY KORNÉL, 23  
 MATEJKA JUDIT, 43  
 MEDVECZKY ZSÓFIA, 45  
 MÉRAI LÁSZLÓ, 202  
 MÉSZÁROS JÁNOS PÉTER, 167  
 MOLNÁR BARNABÁS, 215  
 MOLNÁR JÁNOS, 153  
 MÓZNER ORSOLYA, 78  
 MUDRA ÁGNES KRISZTINA, 139  
 MUSZA ALEXANDRA, 58  
 MUZSEK BARBARA, 144  
 NAGY CYNTHIA NÓRA, 27  
 NAGY EMESE, 181  
 NAGY ENIKŐ, 191  
 NAGY IMRE ATTILA, 189  
 NAGY SÁNDOR, 199, 253  
 NAGY SEBESTYÉN, 47  
 NAJÓCZKI FERENC, 192  
 NEMCSOK TAMÁS, 239  
 NÉMETH SZILVIA, 44  
 NÉMETH ZSÓFIA, 56  
 NUSSEK DÁVID GYÖRGY, 145  
 ÖLVETI GÁBOR, 187  
 ONDOK RÓBERT CSABA, 50  
 ORBÁN BALÁZS, 119  
 PALÁSTI DÁVID JENŐ, 15  
 PÁLINKÁS DÓRA CSILLA, 247  
 PÁLVÖLGYI ÁDÁM MÁRK, 237  
 PAPP SZILVESZTER, 104  
 PARRAGH DÁVID MÁTÉ, 123  
 PERCZE KRISZTINA, 85  
 PETRÓ JÓZSEF LEVENTE, 205  
 PETROVICS NOÉMI, 94  
 PÓSA VIVIEN, 250

PUSKÁS JÁNOS, 113  
 REHO DÓRA, 18  
 REKOB ÁDÁM, 61  
 RÓTH CSABA, 158  
 ROZBACH MARGARÉTA, 70  
 RÓZSA ZSÓFIA BORBÁLA, 101  
 RÓZSÁR DÁNIEL, 227  
 RUDOLF MIHÁLY MÁTYÁS, 11  
 SÁLYI GERGŐ, 229  
 SAMU ANGELIKA ANITA, 62  
 SARKADI ZSÓFIA, 103  
 SCHALL ESZTER, 95  
 SIKORA EMŐKE, 156  
 SIMKÓ IRÉN, 102  
 SIMON FRUZZINA, 190  
 SIMON MÁRTON, 201  
 SLEZSÁK JÁNOS, 14  
 SOLYMOSI BENEC, 180  
 SOMOSI ZOLTÁN, 38  
 SÓS LÁSZLÓ, 49  
 SUPALA ESZTER, 68  
 SZABÓ ANNA, 51  
 SZABÓ ZITA, 240  
 SZAKOLCZAI ANETT, 26  
 SZÉKELY VIRÁG, 73  
 SZEKERES KRISZTINA, 130  
 SZENTIRMAI VERONIKA, 118  
 SZENTJÓBI HAJNALKA, 206  
 SZŐKE ÁRPÁD FERENC, 127  
 TACSI KORNÉLIA, 143  
 TAKÁCS PIROSKA, 71  
 TARJÁNI ARIELLA JANKA, 146  
 TIHANYI GERGELY, 77  
 TORDAI KLAUDIA TERÉZ, 83  
 TÓTH BOTOND, 169  
 TÓTH GÁBOR, 28  
 TÓTH KRISZTINA, 181  
 TRAJ ADRIÁN, 164  
 TRIPOLSKY ANNA, 207  
 VÁCZI VIOLETTA, 183  
 VADAS DÁNIEL, 155  
 VARGA BENEC, 238  
 VARGA KRISZTINA, 178, 182  
 VARGA MÁRTA GEORGINA, 166  
 VARGA NORBERT, 163  
 VARGA VERONIKA, 177  
 VIG ÁRPÁD, 17  
 WACHTLER ALEXANDRA, 225  
 ZÁLKA DÓRA, 129  
 ZSIDÓ ERNA, 218  
 ZWILLINGER MÁRTON, 216